

ПЕРСПЕКТИВНІ ТА ПРІОРИТЕТНІ НАПРЯМИ НАУКОВИХ ДОСЛІДЖЕНЬ У ГАЛУЗІ НАНОМАТЕРІАЛІВ

Малишев В. В., Габ А. І.

ВСТУП

Терміни «наноматеріали» і «нанотехнології» в їх сучасному розумінні в науковій літературі з'явилися понад 30 років тому. Перші технології виробництва наноматеріалів пов'язують з одержанням ще в Давньому Єгипті кольорового скла, забарвленого наночастинками металів. Також появу наноматеріалів пов'язують з колоїдними системами¹. Сучасне розуміння нанотехнологій і наноматеріалів» запропоновано² з принципово новими підходами до створення останніх «знизу вгору» і «згори вниз». Перший підхід передбачає здійснення атомарного або молекулярного самоскладання, а другий – механічне диспергування, інтенсивні пластичні деформації тощо. Експериментальні дослідження початку ХХІ століття показали, що розвиток нанотехнологій гальмується нестачею інформації щодо їх поведінки в реальних системах. Цей недолік можна ліквідувати шляхом проведення фундаментальних досліджень зі встановленням можливостей використання нанодисперсних матеріалів у різних галузях науки й техніки. Тематика таких досліджень зазвичай перебуває на стику різних галузей науки (фізики, хімії, біології та медицини).

В сучасному розумінні нанотехнології (НТ) – це процеси створення речовин, матеріалів, пристроїв, агрегатів, функціонування яких визначається структурою з розмірами окремих фрагментів від 1 до 100 нм. Наноматеріали (НМ) – це продукти нанотехнологій у вигляді матеріалів з функціональними властивостями, які визначаються нанометровим діапазоном їх структури. Більшість матеріалів має багаторівневу структуру. Нанорівень структури існує в будь-якому матеріалі, проте далеко не в кожному з них він відіграє

¹ Platikanov D., Exerowa D. Highlights in Colloid Science / eds. Wiley-VCH, Weinheim, 2009. 306 p. ISBN 978-3527320370. DOI 10.1002/anie.200900361.

² Feynman R.P. There's Plenty of Room at the Bottom. Miniaturization / H.D. Gilbert, Ed. NY : Reinhold, 1961. P. 282–296.

визначальну роль у формуванні функціональних властивостей³. Існування ієрархічно структурованих систем визначає наявність складності й різноманіття взаємодій на різних рівнях організації матерії. Особливого значення вивчення й моделювання таких систем набувають у зв'язку з інтенсивним розвитком інформаційних, енерго- та ресурсозбережних технологій, технологій переробки вторинної сировини, біохімії та фармацевції, захисту довкілля й безпосередньо нанотехнологій.

У статті⁴, мабуть, уперше поставлено питання про раціональне співвідношення фундаментальних і прикладних досліджень під час розроблення нових наноматеріалів і нанотехнологій. Фундаментальними знаннями вважається наукова інформація про явища та процеси в наносистемах, а прикладними – використання цих явищ і процесів у апаратах та процесах виробництва наноматеріалів. Нанотехнології, на відміну від традиційних, характеризуються високоінтелектуальною діяльністю, підвищеними наукоємністю і затратністю⁵. Шлях одержання наноматеріалів від лабораторних досліджень до промислового виробництва значно складніший, ніж для звичайних продуктів.

Взаємозв'язок фундаментальних і прикладних досліджень у галузі НМ і НТ очевидний. Основні шляхи фундаментальних досліджень у цій галузі визначаються необхідністю створення нових функціональних і конструкційних матеріалів для енергетики та інформаційних технологій, авіації та космосу, авто- і залізничного транспорту, суднобудування, будівництва, медицини, створення нових ліків і препаратів, біоматеріалів та охорони здоров'я, виробництва та зберігання харчових продуктів, охорони довкілля тощо. На відміну від прикладних досліджень, фундаментальні вирізняються невизначеною заздалегідь ефективністю в напрямках створення НМ і НТ. При цьому шлях від оригінальної наукової ідеї до її практичного втілення може виявитися надто складним і непередбаченим, тому фінансування фундаментальної науки в галузі НМ і НТ здійснюється державою в багатьох країнах.

³ Whitesides G.M. Nanoscience, Nanotechnology, and Chemistry. *Small*. 2005. V. 1. No. 2. P. 172–179. DOI: 10.1002/sml.200400130.

⁴ «Золотое сечение» нанотехнологической науки. *Вестник Российской академии наук*. 2007. Т. 77. № 11. С. 987–990.

⁵ Мелихов И.В. Какая нанотехнологическая программа нужна России. *Альтернативная энергетика и экология*. 2007. № 1 (45). С. 20–21.

1. Особливості властивостей наноматеріалів. Нові підходи в нанотехнології

Під час переходу речовини в наностан вона набуває принципово нових хімічних, фізичних та механічних властивостей. Зміна хімічних властивостей визначається наявністю великої частки «поверхневих атомів», отже, значним внеском енергії межі поділу в термодинамічні характеристики системи. За появи нових властивостей може змінюватися відносна стабільність модифікацій нанофаз, яка не притаманна об'ємному стану, формуванню агломератів або агрегатів наночасток, зміні механізму або кінетики реакцій, дифузійному (іонному, електронному) транспорту речовини й перенесенню заряду на межі поділу фаз. При цьому відбуваються істотні зміни механізмів формування наночастинок та їх агрегатів з появою морфологічної різноманітності наноб'єктів. Велика площа поверхні та наявність метастабільних фаз із великим числом потенційно активних центрів гетерофазної взаємодії сприяють істотному підвищенню каталітичної активності таких наноматеріалів. Зазначені особливості також приводять до змін термічної стабільності наносистем, параметрів теплопровідності, теплоємності тощо.

«Ефекти близькості», пов'язані з перекриванням зон Фермі під час контакту складових частин наноматеріалу або нанокompозиту, а також зазначених матеріалів з газуватим або рідким середовищем суттєво впливають на фізичні властивості. При цьому також наявні ефекти тунелювання. Квантово-розмірний фактор приводить до виникнення нових оптичних, електронних і магнітних характеристик. Необхідно відзначити, що в таких наносистемах специфічним чином реалізуються далекодійні обміни, зокрема магнітні. Отже, ансамблі наночастинок виявляють нові властивості, чутливі до зовнішніх умов. За рахунок реалізації кросс-кореляції різних фізичних характеристик отримують багатофункціональні матеріали з унікальними властивостями.

Предметами перспективних досліджень у розумінні фундаментальних властивостей наностану є такі:

– фізико-хімічна природа морфологічного різноманіття наноб'єктів, зокрема наночастинок, нанотрубок, нанокластерів, нанострічок, нановіскерів і тетраподів⁶;

⁶ Garnweitner G., Niederberger M. Organic chemistry in inorganic nanomaterials synthesis. *J. Mater. Chem.* 2008. V. 18. P. 1171–1182. DOI 10.1039/B713775C.

- природа функціонального різноманіття властивостей гібридних матеріалів на основі фулеренів та їх похідних, одно- й багатостінних вуглецевих нанотрубок, графену тощо^{7, 8};
- механізми дефектоутворення в об'ємних, планарних та одновимірних наноматеріалах⁹;
- вплив дефектів у нанокристалічних напівпровідниках на ефективність перенесення заряду й генерування випромінювання¹⁰;
- особливості іонного та електронно-іонного транспорту в наноструктурованих матеріалах¹¹;
- крос-кореляції магнітних, електричних та оптичних властивостей наноматеріалів на основі оксидів, халькогенідів, пніктогенідів, галогенідів металів тощо¹²;
- закономірності еволюції електричних, магнітних оптичних і теплофізичних властивостей нанодисперсних речовин і матеріалів у процесі їх формування з пароподібних та рідких середовищ, включаючи надкритичні¹³;
- еволюція структурних і фазових перетворень під час переходу від масивних до нанодисперсних зразків матеріалів тотожного хімічного складу¹⁴;
- вплив природи основи на формування наноструктур^{15, 16};

⁷ Mateo-Alonso A., Tagmatarchis N., Prato M. Fullerenes and Their Derivatives. *Nanomaterials Handbook* / Yu. Gogotsi, Ed. CRC Press; Taylor and Francis, Boca Raton, FL, USA. 2006. P. 29–68. DOI 10.1201/9781420004014.

⁸ Покропивний В.В., Ивановский А.Л. Новые наноформы углерода и нитрида бора. *Успехи химии*. 2008 Т. 77. № 10. С. 899–937. DOI: 10.1070/RC2008v077n10ABEH003789.

⁹ Hodes G. When Small Is Different: Some Recent Advances in Concepts and Applications of Nanoscale Phenomena. *Advanced Materials*. 2007. V. 19. Iss. 5. P. 639–655. DOI 10.1002/adma.200601173.

¹⁰ Productive Nanosystems. A Technology Roadmap: Technical report / K.E. Drexler, J. Randall, S. Corchnoy, A. Kawczak, L. Michael, Eds. Battelle Memorial Institute and Foresight Nanotech. Institute, 2007. 198 p.

¹¹ Maier J. Ionic transport in nano-sized systems. *Solid State Ionics*. 2004. V. 175. Iss. 1–4. P. 7–12. DOI: 10.1016/j.ssi.2004.09.051.

¹² Wilson S.A., Jourdain R.P.J., Zhang Q. et al. New materials for micro-scale sensors and actuators: An engineering review. *Materials Science and Engineering: R: Reports*. 2007. V. 56. Iss. 1–6. P. 1–129. DOI: 10.1016/j.mser.2007.03.001.

¹³ NSTC'2003. National Nanotechnology Initiative: Supplement to the President's FY 2004 Budget / M.C. Roco, R.S. Williams, P. Elivisatos, Eds. Washington, DC, USA, 2000. 56 p.

¹⁴ Hodes G. When Small Is Different. 648 p.

- механізми деформації руйнування металевих, керамічних і полімерних 3D-наноматеріалів, обумовлені особливостями нанорівня їх структури¹⁷;
- природа й шляхи підвищення зносостійкості та ударної в'язкості в наноструктурованих твердих сплавах¹⁸;
- можливості створення нових наноструктур і наноматеріалів, що проявляють квантові ефекти за кімнатної температури¹⁹;
- природа люмінесценції в нанооб'єктах²⁰;
- особливості морфології нановключень у композитах, які можна використовувати для контрольованої зміни властивостей²¹;
- фізико-хімічна природа процесів, що дають змогу досягти високих значень міцності й пластичності в нанокompозитах²²;
- роль наноструктуризації металів і сплавів у запобіганні корозії, механізми антикорозійної дії покривів;
- механізми виникнення унікальної каталітичної активності нанодисперсних систем;
- специфіка поведінки наноструктурованих діелектриків.

¹⁵ Garnweitner G., Niederberger M. Organic chemistry in inorganic nanomaterials synthesis. 1177 p.

¹⁶ Productive Nanosystems. 135 p.

¹⁷ Moya J.S., Loper-Esterblan S., Pecharroman C. The Challenge of Ceramic/Metal Microcomposites and Nanocomposites. *Prog. Mater. Sci.* 2007. V. 52. P. 1017–1090.

¹⁸ Grigorieva A.V., Tarasov A.B., Goodilin E.A., Badalyan S.M., Rummyantseva M.N., Gaskov A.M., Birkner A., Tretyakov Yu.D. Sensor properties of vanadium oxide nanotubes. *Mendeleev Commun.* 2008. V. 18. P. 6–7. DOI: 10.1016/j.mencom.2008.01.002.

¹⁹ Grigorieva A.V., Goodilin E.A., Anikina A.V., Kolesnik I.V., Tretyakov Yu.D. Surfactants in the formation of vanadium oxide nanotubes. *Mendeleev Commun.* 2008. V. 18. P. 71–72. DOI 10.1016/j.mencom.2008.03.004.

²⁰ Григорьева А.В., Кулова Т.Л., Скундин А.М., Гудилин Е.А., Гаршев А.В., Третьяков Ю.Д. Электрохимическое внедрение лития в многостенные нанотрубки оксида ванадия. *Альтернативная энергетика и экология.* 2008. № 8 (64). С. 86–92.

²¹ Кулова Т.Л., Скундин А.М., Балахонов С.Б., Семенов Д.А., Помранцева Е.А., Вересов А.Г., Гудилин Е.А., Чурагулов Б.Р., Третьяков Ю.Д. Исследование электрохимического внедрения лития в структуру вискероов на основе барий-ванадиевой бронзы $BaV_8O_{21-\delta}$. *Защита металлов.* 2008. Т. 44. № 1. С. 45–48.

²² Fahlman B.D. Chapter 6. Nanomaterials. *Materials Chemistry.* Springer, Netherlands, 2011. P. 457–583. DOI: 10.1007/978-94-007-0693-4.

Без урахування міжчастинкової взаємодії та утворення агрегатів досить складно досягти формування дезагрегованих наночастинок, стабільних суспензій, емульсій та інших колоїдних систем, тому слід проводити детальний аналіз взаємодій у ансамблях нанооб'єктів. Ці взаємодії можуть реалізуватися за рахунок формування нових хімічних зв'язків у ансамблях наночастинок, їх фізичної агрегації, процесів обміну речовиною або енергією. Саме такий підхід здатний пояснити поведінку реальних систем. Низка найважливіших функціональних характеристик визначається динамікою та спрямованістю різних транспортних явищ. Такими явищами можуть бути перенесення речовини, енергії, заряду через розвинені межі поділу фаз.

Для створення наноструктурованих систем найефективнішими є підходи самоскладання й самоорганізації. Дослідження взаємодій ансамблів нанооб'єктів як між собою, так і з макрооб'єктами є одним із найважливіших теоретичних і практичних завдань. За даними досліджень його вирішення важливими є такі напрями:

- особливості термодинаміки нанодисперсних систем, включаючи колоїдні розчини й супрамолекулярні структури;
- механізми нековалентних взаємодій і самоорганізації молекул у супрамолекулярних системах;
- еволюція наносистем під впливом градієнтів температури, тиску та інших зовнішніх полів;
- ієрархія і взаємозв'язок нано-, мезо- і макрорівнів структури в наноматеріалах²³;
- закономірності формування й властивості «нанорідин»;
- природа синергізму властивостей складових частин наноконкомпозитів на основі металевих, полімерних і керамічних матриць та наповнювачів, а також вуглецевих нанотрубок;
- принципи функціоналізації текстильних тканин із захисними властивостями від термічних, хімічних, світлових біологічних дій;
- механізми хімічних і структурних перетворень речовин у нанореакторах;
- механізм взаємодій на поверхні твердих тіл, покритих наночастинками;
- фізикохімія взаємодій металевих, магнітних і напівпровідникових наночастинок із компонентами біоактивних рідин і клітинними мембранами;

²³ Grigorieva A.V. et al. Surfactants in the formation of vanadium oxide nanotubes. 71 p.

- явища нанофрагментації кристалів під час інтенсивної пластичної деформації металів;
- механізми організації речовин у процесах компактування і спікання задля формування нанокераміки;
- міграція нанодисперсних речовин у природних і техногенних середовищах;
- формування супрамолекулярних матеріалів, призначених для створення хімічних і біологічних сенсорів і активних елементів мікро- та оптоелектроніки;
- механізми процесів агрегації та агломерації наночастинок під час формування нанодисперсних продуктів²⁴;
- явище тиксотропного відновлення структури в нанодисперсних системах;
- структурні перетворення в металевих і неметалевих нанокластерах²⁵;
- функціонування елементів молекулярної електроніки й наноелектроніки, молекулярних пристроїв і машин.

Сучасні мікроелектронні пристрої за своїм розміром наближаються до межі літографічних процесів, тому розвиток галузей нанотехнології, пов'язаних з об'єднанням окремих нанокристалів у функціональні мережі, є перспективним. Дійсно, колоїдні системи можна розглядати як нанорозмірні структурні елементи або взаємозамінні блоки для створення різних наномеханізмів і нанопристроїв.

Самоорганізація та самоскладання можуть бути альтернативними підходами до організації складних систем з окремих елементарних блоків. При цьому необхідно враховувати такі моменти:

- контроль процесів самоорганізації потребує розуміння не лише міжчастинкових взаємодій, але й фізико-хімічних характеристик (конфігурація електронної густини на поверхні кристаліту, параметри пружності й деформованості частинки, кінетичні чинники тощо);
- можливість курування самоскладанням дасть змогу конструювати нові наноструктуровані системи.

Разом із ефектами самоорганізації в наноструктурах можуть виявлятися ефекти самоподібності. Такий підхід дає змогу

²⁴ Roach P., Shirtcliffe N.J., Newton M.I. Progress in superhydrophobic surface development. *Soft Matter*. 2008. V. 4. P. 224–240. DOI: 10.1039/B712575P.

²⁵ Hodes G. When Small Is Different. P. 645.

використовувати наночастинку як елементарний структурний блок з утворенням «надкластерів». Отриманий агрегат можна використовувати як наступний структурний блок для переходу на наступний рівень організації системи. Одержаний таким чином агрегат буде самоподібним. Його опис цілком можливий у рамках фрактальної геометрії. Типовими прикладами формування наносистем з упорядкованою структурою можуть бути самоскладальні моношари, плівки Ленгмюра-Блоджетт, рідкокристалічні матеріали, полімери і композити на їх основі.

2. Нові підходи в нанотехнології.

Розроблення методів аналізу наносистем і наноматеріалів

Отримання наноматеріалів – це створення метастабільних систем із заданою ієрархічною просторовою організацією та заданими унікальними фізичними, фізико-хімічними й біологічними властивостями. За таких умов традиційні методи отримання наноматеріалів не завжди приводять до необхідного результату, тому актуальним є розроблення перспективних унікальних методик для конкретних класів наноматеріалів.

Для розроблення нових методів у нанотехнологіях з використанням процесів самоскладання й самоорганізації необхідними й перспективними є дослідження за такими напрямками:

- механізми формування наноматеріалів за рахунок консервативної та дисипативної самоорганізації;
- особливості темплатного синтезу одно-, дво- і тривимірних наноматеріалів із функціональними й поліфункціональними властивостями²⁶;
- синергізм фізико-хімічних дій, тобто шлях до створення нових поколінь наноматеріалів;
- процеси формування об'ємних і планарних наноструктурованих матеріалів у результаті інтенсивної пластичної деформації металів і сплавів, спінодального розпаду твердих і кристалізації аморфних фаз²⁷;

²⁶ Garnweitner G., Niederberger M. Organic chemistry in inorganic nanomaterials synthesis. 1176 p.

²⁷ Григорьева А.В. и др. Электрохимическое внедрение лития в многостенные нанотрубки оксида ванадия. С. 87.

- закономірності формування просторово-впорядкованих масивів наночастинок із використанням нанореакторів різної природи й розмірності;
- фізико-хімічні методи створення штучних наноструктур у просторово-органічних колоїдних системах, засновані на досвіді функціонування живих систем;
- механізми поверхневої функціоналізації нульвимірних, одновимірних матеріалів і моношарових дисперсій²⁸;
- можливості формування наносистем, нанокомпозитів і нанопристроїв на основі краун-ефірів, криптантів, порфіринів, фталоціанінів;
- створення наноматеріалів, здатних реагувати на магнітні, оптичні, термічні, хімічні й механічні дії²⁹;
- перспективи використання координаційних сполук як попередників наноструктурованих матеріалів із різною розмірністю³⁰;
- механізми кластероутворення в рідких, твердих і пароподібних системах;
- можливості використання надкритичних середовищ для створення унікальних наноструктур і наноматеріалів;
- механізми збирання індивідуальних наночастинок у планарні та об'ємні наноматеріали, включаючи колоїдні та фотонні кристали³¹;
- лазерна обробка як шлях до створення нових наноструктур і наноматеріалів;
- об'єднані процеси синтезу та складання наночастинок в об'ємні або планарні макроскопічні структури;
- використання методів сканувальної зондової мікроскопії для складання наноструктур на основі графену, фулеренів, металевих кластерів, напівпровідникових нанокристалів³²;
- перспективи розвитку білкової інженерії у створенні тривимірних наноматеріалів, що поєднують біологічні й небіологічні функціональні фрагменти³³;

²⁸ Grigorieva A.V. et al. Surfactants in the formation of vanadium oxide nanotubes. P. 72.

²⁹ Wilson S.A. et al. New materials for micro-scale sensors and actuators. P. 85.

³⁰ Grigorieva A.V. et al. Surfactants in the formation of vanadium oxide nanotubes. P. 71.

³¹ Ibid. P. 72.

³² Productive Nanosystems. P. 79.

³³ Ibid. P. 153.

- процеси поверхневої адсорбції як ефективний засіб дії на оптичні властивості нанокристалічних матеріалів³⁴;
 - можливості диверсифікації структури й властивостей нанодисперсних функціональних матеріалів під час використання плазмохімічних і гідротермальних процесів;
 - перспективи розвитку «м'якої» нанотехнології, заснованої на застосуванні «розумних» полімерів як нанорозмірних актуаторів, що використовують енергію хімічних перетворень для механічних деформацій;
 - процеси планарного або тривимірного мікродруку інтегрованих пристроїв;
 - процеси створення термічно стабільних аерогелів і аерогелів зі спеціальними функціональними властивостями;
 - особливості отримання наноматеріалів для хімічних джерел струму, паливних елементів, газових і біологічних сенсорів із «молекулярним розпізнаванням»;
 - способи отримання ефективних каталізаторів фотолізу води для водневої енергетики та фотодеградації промислових відходів у екології;
 - способи осадження функціоналізованих шарів на поверхню керамічних і металевих мікрофільтрів і пін для створення мезо-пористих фільтрувальних мембран для хімічної технології, екології та медицини;
 - ефективні способи виготовлення незалежних пристроїв довготривалого зберігання інформації надвисокої ємкості;
 - процеси створення нових матеріалів із високою діелектричною проникністю на основі надтонких (~3–5 нм) шарів оксидів металів для наноелектроніки.
- Розроблення нових типів наноматеріалів проводиться практико-цільовим чином. Це означає вибір найпродуктивніших методів їх отримання з відповідним технологічним регламентом залежно від необхідних параметрів кінцевого продукту. Існують такі дві обставини, які визначають доцільність проведення синтезу нових наноматеріалів:
- використання більш трудомістких і дорогих методів одержання замість традиційних приводить до суттєвого поліпшення наявних або до появи принципово нових властивостей;

³⁴ Hodes G. When Small Is Different. P. 646.

– необхідність мініатюризації приладів, використовуваних у побуті й техніці, зменшення їх енергоємності та енергоспоживання приводять до збільшення ефективності використання.

Для створення нових типів наноматеріалів необхідні дослідження за такими напрямками:

- структурний дизайн наноматеріалів;
- синтез нових поліфункціональних наноматеріалів із крос-кореляцією магнітних, електричних та оптичних властивостей³⁵;
- пошук нових матеріалів із контрольованою забороненою фотонною смугою³⁶;
- розроблення фундаментальних основ створення нових поколінь термоелектричних і магнітокалоричних матеріалів на основі «наноблокових» і «наноклітинних» структур і супрамолекулярних сполук;
- вивчення механізмів утворення магнітних наноструктурованих матеріалів зі склоподібних;
- створення тонкоплівкових п'єзоелектричних покривів і гетеро-структур для перетворення механічної енергії на електричну^{37, 38};
- створення наноструктурованих покривів із максимальним світлопоглинанням для прямого перетворення електромагнітного випромінювання на теплову енергію³⁹ або таких, що мають фотоелектричний ефект⁴⁰;
- розроблення фундаментальних основ створення наноструктур з великим сенсорним сигналом, чутливістю й селективністю⁴¹;
- вивчення механізмів формування нанокомпозитів, стійких в екстремальних умовах експлуатації (авіація, космос, атомні реактори)⁴²;
- створення термо- й корозійностійких нанопокривів;

³⁵ Wilson S.A. et al. New materials for micro-scale sensors and actuators. P. 67.

³⁶ Productive Nanosystems. P. 68.

³⁷ Ibid. P. 69.

³⁸ Wilson S.A. et al. New materials for micro-scale sensors and actuators. P. 62.

³⁹ Productive Nanosystems. P. 112.

⁴⁰ Shao Y., Bazan G.C., Heeger A.J. Long-Lifetime Polymer Light-Emitting Electrochemical Cells. *Adv. Mater.* 2007. V. 19. Iss. 3. P. 365–370. DOI: 10.1002/adma.200602087.

⁴¹ Wilson S.A. et al. New materials for micro-scale sensors and actuators. P. 63.

⁴² Кобаяси Н. Введение в нанотехнологию. Москва : Бином, 2008. 134 с. ISBN: 978-5-94774-841-3.

- синтез мезопористих гібридних матеріалів з високою акумулювальною здатністю енергоносіїв (водню, метану тощо)⁴³;
- розроблення високоселективних мембранних наноматеріалів для фільтрування води й використання в добувній і нафтохімічній галузях промисловості;
- синтез нових наноматеріалів, інспірованих живими системами;
- створення дендримірних наноструктур, що мають біоподібність^{44, 45};
- синтез наноматеріалів із фрактальною структурою⁴⁶;
- синтез об'ємних біоматеріалів шляхом збірки молекул нуклеїнових кислот;
- створення біоінспірувальних супергідрофобних нанопокривів як засобів поліпшення функціональних властивостей текстильних, полімерних, будівельних матеріалів і скла⁴⁷;
- розроблення принципів інженерії заміників кісткових тканин і шкірних покривів, заснованої на створенні нових типів гібридних наноматеріалів;
- розроблення фундаментальних основ створення нанокомпозитів, що включають термопластичні полімери;
- пошук нових полімерних матеріалів для нанодрукарської літографії;
- розроблення процесів крейзингу полімерів у рідких середовищах як шлях до створення нових типів вуглецевих наноматеріалів і нанокомпозитів;
- розроблення металокомплексних нанорозмірних каталізаторів, призначених для створення перспективних полімерних матеріалів і тонкого органічного синтезу;
- створення високоефективних нанопористих сорбентів екологічно шкідливих речовин (важких металів, радіонуклідів), пошуки

⁴³ Guo Y.-G., Hu J.-S., Wan L.-J. Nanostructured Materials for Electrochemical Energy Conversion and Storage Devices. *Adv. Mater.* 2008. V. 20. P. 2878–2887. DOI: 10.1002/adma.200800627.

⁴⁴ Productive Nanosystems. P. 108.

⁴⁵ Кобаяси Н. Введение в нанотехнологию. С. 74.

⁴⁶ Максимов А.И., Мошников В.А., Таиров Ю.М., Шилова О.А. Основы золь-гель-технологии нанокомпозитов: монография. Санкт-Петербург: Техномедиа; Элмор, 2007. 255 с. ISBN: 978-5-8114-1417-8.

⁴⁷ Roach P. et al. Progress in superhydrophobic surface development. P. 235.

нових поколінь наноматеріалів, призначених для вирішення проблем «екологічної безпеки»^{48, 49};

– створення наноматеріалів для генерування, перетворення, оброблення електромагнітного випромінювання терагерцового діапазону;

– пошук нових наноматеріалів для «білих» світловипромінювальних діодів високої яскравості та ефективності⁵⁰;

– розроблення матеріалів на основі наноструктур, що поглинають електромагнітне випромінювання в широкому інтервалі частот;

– створення наноматеріалів на основі нанокомпозитів для оптоелектроніки, сенсорної техніки, магнітної томографії, мікроскопії надвисокої роздільної здатності;

– розроблення нових підходів до створення наноматеріалів спінтроніки⁵¹;

– пошук нових наноматеріалів для альтернативних джерел енергії, включаючи гнучкі сонячні батареї, портативні паливні елементи, акумулятори водню, електрохімічні джерела струму, термоелектричні джерела струму, суперконденсатори⁵²;

– розроблення наноматеріалів для пристроїв пам'яті, перемикачів, запису інформації, детекторів, дисплеїв, фільтрів, ізоляторів, молекулярних пристроїв і мікромашин;

– створення хемосенсорних наноматеріалів і мікронаночипів для пристроїв неінвазивного контролю стану людини;

– розроблення конструкційних і жароміцних сплавів, зміцнених нанооб'єктами⁵³;

– дослідження можливостей створення нових багатофункціональних нанокомпозитів і гібридних органічно-неорганічних матеріалів⁵⁴;

⁴⁸ Productive Nanosystems. P. 24.

⁴⁹ Кобаяси Н. Введение в нанотехнологию. С. 59.

⁵⁰ Shao Y. et al. Long-Lifetime Polymer Light-Emitting Electrochemical Cells. P. 367.

⁵¹ Xu Y.B., Thompson S.M. Spintronic Materials and Technology. Taylor and Francis, London, UK, 2007. 423 p. ISBN: 978-0-8493-9299-3

⁵² Guo Y.-G. et al. Nanostructured Materials for Electrochemical Energy Conversion and Storage Devices. P. 2881.

⁵³ Xu Y.B., Thompson S.M. Spintronic Materials and Technology. P. 325.

⁵⁴ Guo Y.-G. et al. Nanostructured Materials for Electrochemical Energy Conversion and Storage Devices. P. 2883.

– створення різнорозмірних нанокомпозитів зі властивостями мультифероїків, включаючи магнітоелектричні матеріали.

Моделювання – це важлива складова частина досліджень у галузі наносистем, наноматеріалів і нанотехнологій. Результатами його здійснення можуть бути такі:

- підтвердження або спростування отриманих експериментальних даних;
- отримання унікальних перспективних прогнозів;
- істотне скорочення та спрощення розроблення й впровадження нових наноматеріалів.

Для моделювання об'єктів і процесів нанотехнологій необхідні фундаментальні знання, зокрема надійні бази даних довідкових величин, концептуальні теорії побудови й поведінки складних систем, розроблення перспективних програмних кодів для реалізації паралельних обчислень. Процес моделювання НМ і НТ є комплексним і багатомасштабним, об'єднує різні алгоритми поведінки системи від нано- й мезо- до макрорівня. Саме таке моделювання може дати достовірний прогноз очікуваних функціональних характеристик наносистеми загалом. Звичайно, моделювання НМ і НТ є можливим під час використання лише потужних обчислювальних комплексів, зокрема супер-ЕОМ із алгоритмами паралельних обчислень.

До найважливіших напрямів моделювання наноматеріалів і процесів їх формування можна віднести такі:

- моделювання процесів формування різних типів наноструктур і наноматеріалів у квазірівноважних і нерівноважних умовах;
- дизайн і математичне моделювання наноструктурованих конструкційних матеріалів із рекордними механічними параметрами, зокрема з використанням суперкомп'ютерів;
- моделювання процесів самовідновлення металевих, керамічних і полімерних матеріалів, здійснюваного шляхом їх наноструктуризації;
- моделювання *ab initio* процесів деформації та руйнування конструкційних наноструктурованих полімерних матеріалів, металів і сплавів;
- комп'ютерне моделювання процесів спінодального розпаду в металевих, керамічних і полімерних системах;
- моделювання процесів формування дислокаційних структур в об'ємних і планарних матеріалах;

- математичне моделювання процесів самоорганізації в наносистемах і наноматеріалах;
- математичне моделювання транспортних явищ у наноструктурованих матеріалах;
- розвиток методів фізичного моделювання для виявлення можливостей створення принципово нових наноматеріалів⁵⁵;
- молекулярне моделювання наносистем на основі емпіричних (10^6 атомів), напівемпіричних ($< 10^6$ атомів), *ab initio* (> 100 атомів) методів і теорій функціоналу щільності (≥ 100 атомів)⁵⁶;
- моделювання процесів формування нанокластерів у аморфних і склоподібних системах;
- комп'ютерне моделювання еволюції фрактальних наноструктур в золь-гель-процесах⁵⁷;
- моделювання процесів формування вуглецевих наночастинок і нанотрубок;
- розвиток методів комбінаторної хімії в застосуванні до розроблення нових наноматеріалів;
- моделювання діаграм фазового стану нанодисперсних речовин;
- моделювання соціальних наслідків та екологічних ризиків від упровадження нанотехнологій;
- розвиток grid-технологій в наноіндустрії;
- моделювання елементарних операцій із квантовими бітами (кубітами);
- математичне моделювання функціональних властивостей наноматеріалів;
- молекулярне моделювання білків, біомолекул і наноматеріалів, комп'ютерне моделювання взаємодії наноматеріалів із клітинною мембраною, клітинними компартаментами, біомолекулами і білками.

Останнім часом для можливості використання супер-ЕОМ більшістю науковців застосовується віддалений доступ до них (розвиток grid-систем). Прикладом реалізації ефективного доступу по мережі Інтернет до сучасного наукового устаткування може служити використання сканувальних зондових мікроскопів. Це не лише дає змогу отримувати й обробляти експериментальні дані, але

⁵⁵ Productive Nanosystems. P. 36.

⁵⁶ Ibid. P. 59.

⁵⁷ Максимов А.И. и др. Основы золь-гель-технологии нанокompозитов. С. 169.

й є прямою можливістю реалізації одного з найважливіших елементів нанотехнологічної освіти. Значними перешкодами на шляху мініатюризації є квантові й когерентні ефекти, сильні електричні поля, які викликають лавинні пробої, проблема відведення тепла від щільно упакованих структур і вплив точкових дефектів.

Важливу роль під час отримання наноматеріалів відіграють методи їх аналізу. Сучасними методами візуалізації є сканувальна зондова (СЗМ) та просвічувальна електронна мікроскопія високої роздільної здатності, що підвищує інтерес дослідників до наносистем, наноматеріалів і нанотехнологій. Розроблення нових та наявних аналітичних методів і методик аналізу наноматеріалів пов'язано з атестацією та сертифікацією нанопродуктів і їх ліцензуванням. Найяскравіше це проявляється під час розроблення сучасного програмного забезпечення, без якого неможливе функціонування жодної аналітичної методики. Використання аналітичних методів дає змогу отримати поточну експериментальну інформацію, науково планувати й реалізовувати подальші експерименти. Надзвичайно важливим є також розроблення методологічних підходів, пов'язаних із розвитком метрології та стандартизації. До найважливіших напрямів досліджень у цій галузі належать такі:

- розроблення методик візуалізації наносистем і операцій з нанооб'єктами, створення мікро- і наноелектромеханічних пристроїв;
- розвиток методів діагностики наноматеріалів (електронна, сканувальна зондова і близькопольова мікроскопія, оптична спектроскопія, месбауерівська спектроскопія, радіоспектроскопія, SQUID-магнетометрія, аналіз поверхневих явищ і визначення площі поверхні тощо);
- розроблення методик стандартизації наносистем і наноматеріалів⁵⁸;
- дослідження геологічних середовищ і об'єктів, наночастинок в осадових породах, створення геохімічних бар'єрів для контролю за станом навколишнього середовища;
- розроблення фізико-хімічних методів дослідження, діагностики, метрології та сертифікації якості наноматеріалів і наносистем⁵⁹;

⁵⁸ Hansen H.N., Carneiro K., Haitjema H., De Chiffre L. Dimensional Micro and Nano Metrology. *CIRP Annals*. 2006. V. 55. Iss. 2. P. 721–743. DOI: 10.1016/j.cirp.2006.10.005.

⁵⁹ Hansen H.N. et al. Dimensional Micro and Nano Metrology. P. 734.

- розвиток сучасних методів діагностики наноструктур із використанням синхротронного випромінювання;
- отримання й застосування наночастинок для діагностики й візуалізації пухлин та інших патологічних утворень;
- вивчення взаємодії наноматеріалів із біомолекулами та клітинними структурами, впливу на активність ферментів, пероксидного окиснення ліпідів;
- вивчення біодеструкції наноматеріалів у різних середовищах;
- розроблення методів відбору проб для ідентифікації та кількісного аналізу наноматеріалів і розроблення методів виділення наноматеріалів із об'єктів навколишнього середовища, харчових продуктів, пакувальних матеріалів, парфумерно-косметичної продукції, біологічних середовищ;
- розвиток фото-, електро-, рентгенолітографічних способів формування гетероструктур;
- розроблення методів СЗМ-літографії з межею роздільної здатності >10 нм⁶⁰.

Останнім часом все більшого значення набувають інструментальні методи досліджень *in situ* процесів формування наноматеріалів. Велике значення мають спектральні методи аналізу, зокрема спектроскопія комбінаційного розсіювання. Перспективні результати дає використання методів динамічного світлорозсіювання та вимірювання ζ -потенціалу, месбауерівської спектроскопії, вдосконалення технологій сканувальної та просвічувальної електронної мікроскопії.

Тільки маючи повну інформацію про структуру матеріалу, можемо передбачити його властивості, тому ці відомості дуже важливі під час створення нових і використання вже наявних матеріалів.

ВИСНОВКИ

Систематизовані напрями фундаментальних досліджень у галузі нанотехнологій і наноматеріалів можуть бути поштовхом до передбачення та створення нового покоління матеріалів і технологій. Передбачено, що перспективним стане вирішення таких проблем:

- створення нових екологічно чистих джерел струму;
- збереження та поліпшення умов життя людини та довкілля;

⁶⁰ Fahlman B.D. Nanomaterials. P. 499.

- максимальне збільшення продуктивності різних галузей народного господарства;
- розроблення та використання перспективних інформаційних технологій.

Реалізація цих завдань дасть змогу в перспективі вирішити багато проблем. Наноструктуровані матеріали на основі високотемпературних надпровідників сприятимуть створенню нових систем генерування, акумулювання й транспортування енергії. Можливим є розроблення високоефективних альтернативних нафті й газу джерел енергії (сонячні батареї, водневі двигуни). Використання високотемпературних композитів на основі важкоплавких сполук дасть змогу підвищити ККД двигунів внутрішнього згорання до 70% і вище. Використання нових якісних матеріалів для будівництва ядерних реакторів та застосування й регенерації ядерних відходів може дати змогу підвищити тривалість експлуатації атомних станцій у 3–5 разів.

АНОТАЦІЯ

Нестачу інформації щодо розвитку нанотехнологій можна ліквідувати завдяки проведенню фундаментальних досліджень у різних галузях науки й техніки та на їх стику. Основні шляхи таких досліджень у сфері нанотехнологій визначаються необхідністю створення нових функціональних і конструкційних матеріалів для різних галузей промисловості та повсякденного життя.

Узагальнено предмети перспективних досліджень наностану, результати вивчення взаємодії ансамблів нанооб'єктів як між собою, так і з макрооб'єктами. Сформульовано найважливіші напрями розроблення нових методів у нанотехнологіях із використанням процесів самоскладання та самоорганізації. Запропоновано перспективні напрями створення нових типів наноматеріалів. Підкреслено, що процес моделювання наноматеріалів і нанотехнологій потребує об'єднання різних алгоритмів поведінки системи від нано- й мезо- до макрорівня; узагальнено найважливіші напрями моделювання наноматеріалів і процесів їх формування. Зазначено, що підвищений рівень методів сучасної візуалізації підвищує рівень досліджень у цій галузі.

Передбачається, що перспективними проблемами стануть нові екологічно чисті джерела струму, питання поліпшення довкілля та умов життя, збільшення продуктивності галузей народного господарства, а також перспективні інформаційні технології.

ЛИТЕРАТУРА

1. Platikanov D., Exerowa D. Highlights in Colloid Science. Wiley-VCH, Weinheim, 2009. 306 p. ISBN 978-3527320370. DOI: 10.1002/anie.200900361.
2. Feynman R.P. There's Plenty of Room at the Bottom. Miniaturization / H.D. Gilbert, Ed. NY : Reinhold, 1961. P. 282–296.
3. Whitesides G.M. Nanoscience, Nanotechnology, and Chemistry. *Small*. 2005. V. 1. No. 2. P. 172–179. DOI: 10.1002/sml.200400130.
4. Мелихов И.В. «Золотое сечение» нанотехнологической науки. *Вестник Российской академии наук*. 2007. Т. 77. № 11. С. 987–990.
5. Мелихов И.В. Какая нанотехнологическая программа нужна России. *Альтернативная энергетика и экология*. 2007. № 1 (45). С. 20–21.
6. Garnweitner G., Niederberger M. Organic chemistry in inorganic nanomaterials synthesis. *J. Mater. Chem.* 2008. V. 18. P. 1171–1182. DOI: 10.1039/B713775C.
7. Mateo-Alonso A., Tagmatarchis N., Prato M. Fullerenes and Their Derivatives. *Nanomaterials Handbook* / Yu. Gogotsi, Ed. CRC Press; Taylor and Francis, Boca Raton, FL, USA. 2006. P. 29–68. DOI: 10.1201/9781420004014.
8. Покропивный В.В., Ивановский А.Л. Новые наноформы углерода и нитрида бора. *Успехи химии*. 2008 Т. 77. № 10. С. 899–937. DOI: 10.1070/RC2008v077n10ABEH003789.
9. Hodes G. When Small Is Different: Some Recent Advances in Concepts and Applications of Nanoscale Phenomena. *Advanced Materials*. 2007. V. 19. Iss. 5. P. 639–655. DOI: 10.1002/adma.200601173.
10. Productive Nanosystems. A Technology Roadmap: Technical report / K.E. Drexler, J. Randall, S. Corchnoy, A. Kawczak, L. Michael, Eds. Battelle Memorial Institute and Foresight Nanotech. Institute, 2007. 198 p.
11. Maier J. Ionic transport in nano-sized systems. *Solid State Ionics*. 2004. V. 175. Iss. 1–4. P. 7–12. DOI: 10.1016/j.ssi.2004.09.051.
12. Wilson S.A., Jourdain R.P.J., Zhang Q. et al. New materials for micro-scale sensors and actuators: An engineering review. *Materials Science and Engineering: R: Reports*. 2007. V. 56. Iss. 1–6. P. 1–129. DOI: 10.1016/j.mser.2007.03.001.
13. NSTC'2003. National Nanotechnology Initiative: Supplement to the President's FY 2004 Budget / M.C. Roco, R.S. Williams, P. Elivisatos, Eds. Washington, DC, USA, 2000. 56 p.

14. Moya J.S., Loper-Esterblan S., Pecharroman C. The Challenge of Ceramic/Metal Microcomposites and Nanocomposites. *Prog. Mater. Sci.* 2007. V. 52. P. 1017–1090.

15. Grigorieva A.V., Tarasov A.B., Goodilin E.A., Badalyan S.M., Rumyantseva M.N., Gaskov A.M., Birkner A., Tretyakov Yu.D. Sensor properties of vanadium oxide nanotubes. *Mendeleev Commun.* 2008. V. 18. P. 6–7. DOI: 10.1016/j.mencom.2008.01.002.

16. Grigorieva A.V., Goodilin E.A., Anikina A.V., Kolesnik I.V., Tretyakov Yu.D. Surfactants in the formation of vanadium oxide nanotubes. *Mendeleev Commun.* 2008. V. 18. P. 71–72. DOI: 10.1016/j.mencom.2008.03.004.

17. Григорьева А.В., Кулова Т.Л., Скундин А.М., Гудилин Е.А., Гаршев А.В., Третьяков Ю.Д. Электрохимическое внедрение лития в многостенные нанотрубки оксида ванадия. *Альтернативная энергетика и экология.* 2008. № 8 (64). С. 86–92.

18. Кулова Т.Л., Скундин А.М., Балахонов С.Б., Семененко Д.А., Померанцева Е.А., Вересов А.Г., Гудилин Е.А., Чурагулов Б.Р., Третьяков Ю.Д. Исследование электрохимического внедрения лития в структуру вискеров на основе барий-ванадиевой бронзы $\text{BaV}_8\text{O}_{21-\delta}$. *Защита металлов.* 2008. Т. 44. № 1. С. 45–48.

19. Fahlman, B.D. Chapter 6. Nanomaterials. *Materials Chemistry / B.D. Fahlman.* Springer, Netherlands, 2011. P. 457–583. DOI: 10.1007/978-94-007-0693-4.

20. Roach P., Shirtcliffe N.J., Newton M.I. Progress in superhydrophobic surface development. *Soft Matter.* 2008. V. 4. P. 224–240. DOI: 10.1039/B712575P.

21. Shao Y., Bazan G.C., Heeger A. J. Long-Lifetime Polymer Light-Emitting Electrochemical Cells. *Adv. Mater.* 2007. V. 19. Iss. 3. P. 365–370. DOI: 10.1002/adma.200602087.

22. Кобаяси Н. Введение в нанотехнологию. Москва : Бином, 2008. 134 с. ISBN: 978-5-94774-841-3.

23. Guo Y.-G., Hu J.-S., Wan L.-J. Nanostructured Materials for Electrochemical Energy Conversion and Storage Devices. *Adv. Mater.* 2008. V. 20. P. 2878–2887. DOI 10.1002/adma.200800627.

24. Максимов А.И., Мошников В.А., Таиров Ю.М., Шилова О.А. Основы золь-гель-технологии нанокompозитов : монография. Санкт-Петербург : Техномедиа ; Элмор, 2007. 255 с. ISBN: 978-5-8114-1417-8.

25. Xu Y.B., Thompson S.M. Spintronic Materials and Technology. Taylor and Francis, London, UK, 2007. 423 p. ISBN: 978-0-8493-9299-3.

26. Hansen H.N., Carneiro K., Haitjema H., De Chiffre L. CIRP Annals – Manufacturing Technology. 2006. V. 55. Iss. 2. P. 721–743. DOI: 10.1016/j.cirp.2006.10.005.

Information about the authors:

Malyshev Viktor Volodymyrovych,
Doctor of Technical Sciences, Professor,
Head

Institute of Engineering and Technology
of Open International University of Human Development “Ukraine”
23, Lvivska str., Kyiv, 03115, Ukraine

Gab Angelina Ivanivna,
Candidate of Chemical Sciences, Associate Professor,
Institute of Engineering and Technology
of Open International University of Human Development “Ukraine”
23, Lvivska str., Kyiv, 03115, Ukraine