

Новосибирский государственный университет
Институт неорганической химии им. А.В. Николаева СО РАН
Институт катализа им. Г.К. Борескова СО РАН
Институт физики полупроводников им. А.В. Ржанова СО РАН
Институт общей и неорганической химии им. Н.С. Курнакова РАН
Сибирское отделение Российской академии наук

Четвертая российская конференция

ГРАФЕН

МОЛЕКУЛА И 2D КРИСТАЛЛ

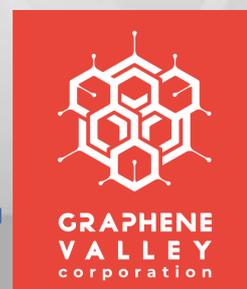
14–18 августа 2023 года

N* Новосибирский
государственный
университет
*НАСТОЯЩАЯ НАУКА



ЦНФМ

РАЗРАБОТКА . МОДЕЛИРОВАНИЕ . ВНЕДРЕНИЕ



Аналитика
ТЕХНОСФЕРА
РЕКЛАМНО-ИЗДАТЕЛЬСКИЙ ЦЕНТР
www.j-analytics.ru
НАУЧНО-ТЕХНИЧЕСКИЙ ЖУРНАЛ

НАНОИНДУСТРИЯ
ТЕХНОСФЕРА
РЕКЛАМНО-ИЗДАТЕЛЬСКИЙ ЦЕНТР
НАУЧНО-ТЕХНИЧЕСКИЙ ЖУРНАЛ

NT-MDT

г. Новосибирск



СО РАН

Уважаемые коллеги!

Благодарим Вас за проявленный интерес к Четвертой российской конференции «Графен: молекула и 2D кристалл» и желание принять участие в её работе. Конференция проходит в научно-образовательном центре города Новосибирска – Академгородке. Мероприятие посвящено актуальным направлениям исследований и разработок в области углеродных и низкоразмерных материалов.

Проведение конференции поможет координации усилий ученых в решении современных проблем материаловедения и привлечению молодых исследователей для решения актуальных научных задач.

Оргкомитет выражает особую благодарность НГУ, Центру компетенций НТИ «Моделирование и разработка новых функциональных материалов с заданными свойствами», компаниям «Диаэм», «НТ-МДТ Спектрум Инструментс» и корпорации «Графеновая Долина» за финансовую поддержку и журналам Аналитика, Наноиндустрия и РЭНСИТ за информационную поддержку.

Искренне надеемся, что пребывание в Новосибирском Академгородке и в стенах Новосибирского государственного университета оставит множество положительных эмоций и приятных впечатлений!

Оргкомитет Конференции



ЦНФМ

РАЗРАБОТКА . МОДЕЛИРОВАНИЕ . ВНЕДРЕНИЕ



Федеральное государственное автономное образовательное учреждение
высшего образования
«Новосибирский национальный исследовательский
государственный университет»

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки
Институт неорганической химии им. А.В. Николаева
Сибирского отделения Российской академии наук

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки
Институт катализа им. Г.К. Борескова
Сибирского отделения Российской академии наук

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки
Институт физики полупроводников им. А.В. Ржанова
Сибирского отделения Российской академии наук

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки
Институт общей и неорганической химии им. Н.С. Курнакова
Российской академии наук

Сибирское отделение Российской академии наук

**Четвертая российская конференция
«ГРАФЕН: МОЛЕКУЛА И 2D-КРИСТАЛЛ»**

Сборник тезисов докладов

14–18 августа 2023 года

УДК 546.26+546.052+546.22

Программа и тезисы докладов Четвертой российской конференции «Графен: молекула и 2D-кристалл» / Ответственный за выпуск А.В. Окотруб. Новосибирск: ИНХ СО РАН, 2023, 171 с.

Сборник содержит доклады Четвертой российской конференции «Графен: молекула и 2D-кристалл», которая проводилась 14–18 августа 2023 года в Новосибирске.

В сборнике представлены доклады по направлениям: химический и CVD синтеза графена и родственных материалов; химическая модификация графена и гибридные 2D материалы; топологические изоляторы и полуметаллы Вейля; диагностика графена и других 2D материалов; теория, строение и моделирование свойств графена и родственных низкоразмерных материалов; электронные, механические, электрохимические и другие свойства и приложения графена и других 2D материалов.

ISBN 978-5-90168-852-6

ОРГАНИЗАТОРЫ КОНФЕРЕНЦИИ

Новосибирский государственный университет
Институт неорганической химии им. А.В. Николаева СО РАН
Институт катализа им. Г.К. Борескова СО РАН
Институт физики полупроводников им. А.В. Ржанова СО РАН
Институт общей и неорганической химии им. Н.С. Курнакова РАН
Сибирское отделение Российской академии наук

ПРОГРАММНЫЙ КОМИТЕТ

Окотруб А.В., д.ф.-м.н., профессор, ИНХ СО РАН, Новосибирск – **председатель**
Брылев К.А., д.х.н., профессор РАН, ИНХ СО РАН, Новосибирск
Бухтияров В.И., академик РАН, ИК СО РАН, Новосибирск
Губин С. П., д.х.н., профессор, ИОНХ РАН, Москва
Елецкий А.В., д.ф.-м.н., профессор, НИУ «МЭИ», Москва
Кузнецов В.Л., к.х.н., ИК СО РАН, Новосибирск
Латышев А.В., академик РАН, ИПФ СО РАН, Новосибирск
Максименко С.А., д.ф.-м.н., профессор, БГУ, Минск
Насибулин А.Г., д.т.н., профессор, Сколтех, Москва
Образцов А.Н., д.ф.-м.н., профессор, МГУ, Москва
Федорук М.П., академик РАН, НГУ, Новосибирск
Чернозатонский Л.А., д.ф.-м.н., профессор, ИБХФ РАН, Москва

СЕКРЕТАРИАТ КОНФЕРЕНЦИИ

Ворфоломеева А.А., ИНХ СО РАН, Новосибирск
Небогатикова Н.А., к.ф.-м.н., ИФП СО РАН, Новосибирск

Магнитный эффект близости в электронной структуре графена и MoS₂Д.Ю. Усачёв

Санкт-Петербургский государственный университет, Университетская наб. 7-9,
Санкт-Петербург, Россия
dmitry.usachov@spbu.ru

DOI: 10.26902/Graphene-23-001

Магнитное поле изменяет оптические свойства и обеспечивает долинное расщепление электронных состояний в монослое MoS₂. Но для того, чтобы добиться заметного изменения свойств требуется магнитное поле силой в десятки Тесла. В то же время благодаря магнитному эффекту близости, возникающему при контакте ферромагнетика с немагнитным материалом, существует возможность получения аналогичного результата при гораздо меньшей величине или при полном отсутствии внешнего магнитного поля. Для изучения этого явления мы синтезировали эпитаксиально монослой MoS₂ на магнитной системе графен/Co. Используя фотоэлектронную спектроскопию со спиновым и угловым разрешением, мы изучили магнитный эффект близости, который вызывает в валентной зоне спиновое расщепление в точке Г и наклон спинов в точке К в сторону намагниченности кобальта, направленной вдоль поверхности. Теоретические расчеты показывают, что параллельная поверхности компонента спина в валентной зоне в точке К локализована в пленке Co, а в зоне проводимости – на слое MoS₂. Расчеты также предсказывают спиновое расщепление 16 мэВ в точке Г и разницу в ширине щели в двух долинах 8 мэВ для внеплоскостной намагниченности. Полученные результаты предполагают контроль над оптическими переходами в MoS₂ через намагничивание Co. Оценки показывают, что эффект магнитной близости эквивалентен действию магнитного поля до 100 Тл [1].

Магнитный эффект близости можно ожидать во многих материалах, включая и графен. Расчеты предсказывают, что графен может быть заметно намагничен за счет близости с ферромагнитной поверхностью. Для исследования такой возможности мы изучили контакт графена с пленкой Co через монослой атомов золота. Оказалось, что наличие дислокационных петель в слое Au под графеном приводит к ферромагнитному упорядочению моментов в двух углеродных подрешетках. Показано, что ширина запрещенной зоны ~80 мэВ в точке К имеет магнитную природу и существует для ферромагнитного упорядочения. Комбинация обменного взаимодействия и эффекта Рашбы проявляется в асимметрии спинового расщепления в фотоэмиссионных спектрах со спиновым разрешением и хорошо согласуется с расчетами из первых принципов. Благодаря противоположной по знаку кривизне Берри для долин К и К', синтезированная система перспективна для реализации эффекта Холла кругового дихроизма [2].

Работа выполнена при финансовой поддержке СПбГУ (грант № 94031444) и Министерства науки и высшего образования РФ [грант № 075-15-2020-797 (13.1902.21.0024)].

[1] Voroshnin V. et al. // ACS Nano. 2022. V. 16. P. 7448-7456.

[2] Rybkin A.G. et al. // Phys. Rev. Lett. 2022. V. 129. P. 226401.

Прозрачные проводящие пленки на основе углеродных нанотрубок

Д.А. Илатовский¹, Е.П. Гильштейн², О.Е. Глухова³, Д.В. Красников¹, А.Е. Гольдт¹,
А.Г. Насибулин¹

¹*Сколковский институт науки и технологии, г. Москва, Россия*

²*Empa Swiss Federal Laboratories for Materials Science and Technology, Überlandstrasse 129,
Dübendorf, 8600 Switzerland*

³*Саратовский национальный исследовательский государственный университет имени
Н. Г. Чернышевского
a.nasibulin@skol.tech*

DOI: 10.26902/Graphene-23-002

Тонкопленочные электропроводящие материалы, обладающие высокой прозрачностью, являются важнейшими компонентами оптоэлектронных устройств. Прогресс в области применения прозрачных проводников требует замены оксида индия-олова (ИТО), одного из ключевых материалов в электронике. Несмотря на то, что ИТО является наиболее часто используемым прозрачным проводящим материалом, он, как и другие оксиды металлов, обладает рядом недостатков, включая ограниченную механическую гибкость, высокий показатель преломления, ограниченную химическую стабильность и ограниченные запасы сырья. Однослойные углеродные нанотрубки являются одной из наиболее перспективных альтернативных материальных платформ, рассматриваемых для создания прозрачных проводящих пленок, благодаря их превосходным оптоэлектронным свойствам и уникальной механической гибкости и растяжимости. Здесь мы анализируем последние достижения в области оптоэлектронных характеристик прозрачных электродов на основе нанотрубок. Мы также описываем дорожную карту для дальнейших исследований и разработок прозрачных проводников, использующих “рациональный дизайн”, который предсказывает возможность получения прозрачных проводников с характеристиками близкими к теоретическому пределу.

Авторы благодарят Российский научный фонд за поддержку проекта № 22-13-00436.

Сверхдлинные углеродные нанотрубки: непрерывный рост жгутов километровой длины и перспективные приложения

В.З. Мордкович, Н.В. Казеннов, Э.Б. Митберг, А.Р. Караева

*Технологический институт сверхтвердых и новых углеродных материалов, Троицк,
Москва, Россия*

mordkovich@yandex.ru

DOI: 10.26902/Graphene-23-003

В настоящей работе представлен метод непрерывного роста сверхдлинных двухстенных углеродных нанотрубок каталитическим разложением углеродсодержащих прекурсоров при температурах 1100–1200 °С. Основы метода были опубликованы ранее [1]. В результате исследований и разработок масштабированного метода реализована опытно-промышленная установка мощностью до 50 кг/год. Реактор оснащен оригинальным устройством для намотки углеродного продукта одновременно на 4 вращающихся барабана, что позволяет производить катушки с общей длиной жгута до 15 километров, диаметр катушки при этом достигает 25 см.

Полученный уникальный материал можно использовать в самых разных сферах: от микроэлектроники до сверхпрочного композитного материала на основе полимеров. Разработаны и масштабированы также технологии получения промежуточных продуктов из углеродных катушек: нити, катаной высокоэлектропроводной ленты, бумаги, устойчивых дисперсий в различных средах. Получены предварительные результаты испытаний нового материала как компонента различных электрохимических технологий и композиционных материалов. Увеличению в ближайшие годы производства нанотрубок и как следствие снижение цен на данную продукцию расширят сферы применения нанотрубок и увеличит потребительский спрос на рынке.

[1] Mordkovich V.Z., Kazennov N.V., Ermolaev V.S. et al. //Diam. Relat. Mater. 2018. V. 83. P. 15-20.

Динамическая стабилизация двумерных электронных систем

О.В. Кибис

*Новосибирский государственный технический университет, 630073 Новосибирск, Россия
oleg.kibis@nstu.ru***DOI: 10.26902/Graphene-23-004**

Динамическая стабилизация представляет собой фундаментальный эффект, заключающийся в стабилизации различных нестабильных систем посредством осциллирующего воздействия на них. Физически, динамическая стабилизация обусловлена появлением локального минимума потенциальной энергии в точке, которая в отсутствие осциллирующего внешнего воздействия соответствовала бы максимуму потенциальной энергии. Этот эффект носит универсальный характер и может проявляться в самых различных областях физики. Так, например, осциллирующее поле лазерного излучения приводит к стабилизации заряженных ионных систем, составные части которых отталкиваются друг от друга по закону Кулона и в отсутствие осциллирующего поля разбежались бы в разные стороны [1]. Однако, несмотря на довольно долгую предысторию эффекта динамической стабилизации, его проявления в наноструктурах все еще ожидают подробного исследования. Чтобы частично восполнить этот пробел, мы проанализировали поведение электронов проводимости в различных двумерных наноструктурах (включая графен) при наличии высокочастотного электромагнитного поля в контексте эффекта динамической стабилизации и обнаружили, что такое поле создает область эффективного притяжения в центре различных отталкивающих потенциалов [2]. Как следствие, в наноструктурах могут возникать светоиндуцированные квазистационарные электронные состояния, локализованные на отталкивающих потенциалах. Показано, что эти состояния приводят к светоиндуцированному спариванию электронов с различными эффективными массами [2,3], дают квантовую добавку к проводимости вследствие резонансного рассеяния Брейта-Вигнера [4], а также приводят к резонансам Фано в оптических спектрах [5] и другим эффектам.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ (грант № 20-12-00001)

[1] van Duijn E. et al. // Phys. Rev. Lett. 1996. V. 77. P. 3759.

[2] Kibis O. V. // Phys. Rev. B. 2019. V. 99. P. 235416.

[3] Kibis O. V. et al. // Opt. Lett. 2021. V. 46. P. 5316.

[4] Kibis O. V. et al. // Phys. Rev. B. 2020. V. 102. P. 075412.

[5] Kibis O. V. et al. // Opt. Lett. 2021. V. 46. P. 50.

Генерация и поглощение терагерцового излучения в графене в условиях распределенной обратной связиК.Г. Батраков*НИИ ядерных проблем БГУ, 220006, ул. Бобруйская, 11, г. Минск, Беларусь,
kgbatrakov@mail.ru***DOI: 10.26902/Graphene-23-005**

Графеновые структуры поддерживают замедленные поверхностные электромагнитные моды, что открывает возможность генерации излучения черенковского типа. Фазовая скорость мод зависит от их частоты и химического потенциала электронной системы графена. Поэтому, при заданной энергии электронного пучка, изменяя химический потенциал, например, путем электростатического допирования, можно изменить частоту черенковского резонанса [1]. Дополнительным способом перестройки частоты и регулирования взаимодействия с излучением является создание распределенной обратной связи (РОС). РОС осуществляет дискриминацию мод при генерации излучения и увеличивает интенсивность взаимодействия волны с электронным пучком за счет непрерывного пере-отражения синхронной с пучком волны в дифрагированную и обратно во всей области генерации. В работе исследуется генерация терагерцового излучения (ТГИ) электронным пучком в пространственно-модулированной графеновой структуре. Путем решения и линеализации самосогласованных уравнений движения электронов и электромагнитной волны выведено дисперсионное уравнение генерации в условиях возбуждения нескольких сильно связанных плазмон-поляритонных волн. Численный анализ уравнения генерации демонстрирует существенное увеличение коэффициента усиления электромагнитной волны по сравнению с немодулированной системой. Изучается также влияние пространственной модуляции на поглощение падающего на графен излучения. Показано, что при параметрах модуляции, позволяющих связать падающую объемную волну с поверхностным плазмон-поляритоном, возникает пик поглощения, частоту которого при заданном периоде решетки можно регулировать электростатическим способом изменяя химический потенциал. Результаты работы могут применяться при разработке новых перестраиваемых детекторов и генераторов ТГц излучения.

Работа выполнена при финансовой поддержке БРФФИ (грант № Ф23МЭ-023)

[1] Batrakov K. and Maksimenko S. // Phys. Rev. B. 2017. V. 95, № 4. P. 205408.

Четверть-металлическое состояние в двухслойном графене**А.В. Рожков, А.Л. Рахманов, А.О. Сбойчаков***Институт теоретической и прикладной электродинамики, ул. Ижорская 13, стр. 6,
Москва, Российская федерация
arozhkov@gmail.com***DOI: 10.26902/Graphene-23-006**

Наличие дополнительного (долинного) вырождения в графене и родственных системах позволяет задуматься о новых видах низкотемпературного упорядочения в таких материалах. В данном докладе мы обсудим возможность возникновения так называемого четверть-металла (ЧМ) в двухслойном графене (ДГ) с АБ упаковкой. Состояние ЧМ обобщает уже хорошо известную концепцию полуметалла («half-metal» в англоязычной литературе) на случай систем с повышенным вырождением поверхности Ферми. Мы теоретически покажем, что в легированном ДГ межэлектронное взаимодействие может приводить к спонтанному образованию ЧМ, а также других «дробных» металлических фаз. В таких фазах четырехкратное вырождение поверхности Ферми снимается полностью или частично, а носители тока испытывают поляризацию по спиновым и/или долинным квантовым числам. Предлагаемый механизм предполагает, что основное состояние нелегированного ДГ – это диэлектрическая волна спиновой плотности. При легировании изолятор разрушается и замещается одной из дробных фаз. По мере увеличения легирования происходят переходы между различными типами дробных фаз (ЧМ сменяется полуметаллом и т.д.). Наши выводы согласуются с недавними экспериментами на легированном ДГ, в которых наблюдался низкотемпературный каскад фазовых переходов.

Магниторезисторы на суперферромагнитах

В.Н. Кондратьев, В.А. Осипов

Лаборатория теоретической физики имени Н.Н.Боголюбова,

ОИЯИ, 141980, Дубна, Россия

vkondrat1401@mail.ru

DOI: 10.26902/Graphene-23-007

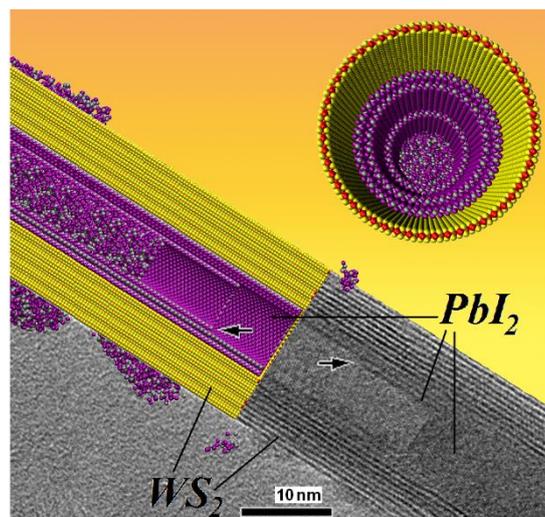
Достижения в области микро- и нано-технологий привели к широкому использованию спинтронных датчиков магнитосопротивления (МС) и/или магниторезистивных датчиков как для записывающих, так и незаписывающих приложений. Такие ультрасовременные магниторезистивные датчики обладают высокой чувствительностью детектируемого сверхслабого поля, которые отвечают требованиям интеллектуальных сенсорных приложений в областях интернета, мобильных устройств, космических технологий, авионавтики, утечки магнитного потока, домотики, окружающей среды, здравоохранения и медицины. Более того, их возможность настройки и миниатюризации, простота интеграции и экономичность делают эти датчики уникально конкурентоспособными с точки зрения массовых применений и производства.

В этой работе рассмотрены ансамбли суперпарамагнитных частиц (СПМ), помещенных в электро-проводящее вещество. При достаточно высокой концентрации СПМ эти метаматериалы проявляют суперферромагнитные свойства и могут быть использованы как датчики МС. Мы исследуем электрический ток между СПМ частицами и показываем, что возникающее гигантское МС определяется соотношением между временами релаксации и пролета между СПМи. Этот эффект усиливается для безмассовых носителей заряда, как в случае графена, и может быть значительным при комнатных температурах.

Капиллярные свойства углеродных и неорганических нанотрубокА.Н. Еняшин*Институт химии твердого тела УрО РАН, ул. Первомайская, 91, Екатеринбург, Россия
enyashin@ihim.uran.ru***DOI: 10.26902/Graphene-23-008**

Углеродные и неорганические нанотрубки являются наночастицами, естественным образом обладающими двумя типами поверхности и высоким удельным объёмом. Наличие полости делает их привлекательными наноконтейнерами для точечной доставки МРТ-контрастных и лекарственных средств, высокоёмкими компонентами электродных материалов, эффективными наполнителями полимерных композитов и темплатами для синтеза иных наноструктур. Однако, такие перспективы использования нанотрубок определяются возможностью их капиллярного наполнения.

В докладе делается обзор имеющихся термодинамических представлений и сведений о кинетике капиллярной абсорбции ионных расплавов и молекулярных жидкостей каналами нанотрубок на основе графеноподобных слоёв углерода, h-BN, MoS₂ и WS₂, полученных с использованием молекулярно-динамического моделирования. Представленные сведения свидетельствуют о чрезвычайно высокой капиллярной активности нанотрубок вне зависимости от их химической природы и поверхностного натяжения жидкости. Неудачные эксперименты по капиллярному наполнению нанотрубок объясняются внутренней структурой абсорбируемой жидкости или закрытыми концами нанотрубок.



Высокочастотные электромагнитные свойства наноуглеродных композитов в диапазоне температур 77–300 КД.С. Быченко^{1,2}, А.Е. Сухоцкий¹, Е.А. Гурневич¹, Я.Д. Коробов¹, М.И. Демиденко¹, С.А. Максименко¹¹Институт ядерных проблем БГУ, ул. Бобруйская 11, Минск, 220006, Беларусь²Томский Государственный Университет, Проспект Ленина 36, Томск, 634050, Россия
dzmitrybychanok@yandex.by**DOI: 10.26902/Graphene-23-009**

В работе представлены результаты исследований электромагнитных свойств композиционных материалов на основе многостенных углеродных нанотрубок [1,2] в диапазоне частот 1–18 ГГц при температурах 77–300 К. Представлена методика проведения исследований их электромагнитного отклика материалов при одновременном варьировании частоты падающей электромагнитной волны и температуры образца. Проведен анализ полученных экспериментальных результатов, определены основные факторы, определяющие электромагнитные свойства наноуглеродных композитов в СВЧ диапазоне при криогенных температурах до 77 К. Показано, что варьирование температуры оказывает существенное влияние на значения коэффициентов прохождения, отражения и поглощения исследуемых материалов. Результаты работы показывают перспективность использования композитов на основе многостенных углеродных нанотрубок в качестве многофункциональных материалов эффективно поглощающих и экранирующих электромагнитное излучение.

Работа выполнена при финансовой поддержке БРФФИ грант Ф22-044.

[1] Okotrub A.V., Bulusheva L.G., Kudashov A.G. et al. // Nanotechnol. Russia. 2008. V. 3. P. 191.

[2] Bychanok D., Gorokhov G., Meisak D. et al. // Prog. Electromagn. Res. M 2017. V. 53. P. 9.

Влияние способа синтеза азот-содержащих углеродных нанотрубок на свойства нанесенного палладия в реакции разложения муравьиной кислоты

О.Ю. Подъячева, А.Н. Коробова, С.А. Яшник, Д.А. Свинцицкий, О.А. Стонкус,
В.И. Соболев, В.Н. Пармон

*Институт катализа СО РАН, проспект Ак. Лаврентьева, 5, Новосибирск, Россия
pod@catalysis.ru*

DOI: 10.26902/Graphene-23-010

В работе исследовано влияние способа синтеза азотсодержащих углеродных нанотрубок (N-УНТ) на свойства и активность катализаторов 1% Pd/N-УНТ в реакции разложения муравьиной кислоты в газовой фазе.

Установлено, что независимо от способа синтеза N-УНТ (CCVD или постобработка окисленных углеродных нанотрубок аммиаком) палладий в катализаторах стабилизируется в виде наночастиц размером 1 нм и изолированных ионов палладия.

Показано, что при использовании метода CCVD формируются бамбукоподобные трубки, азот равномерно встраивается во внешние и внутренние графеновые слои, а активность катализатора определяется присутствием в нем стабильных в кислых и щелочных средах изолированных ионов палладия.

Обнаружено, что при использовании метода постобработки азот встраивается преимущественно во внешние графеновые слои N-УНТ. Значение TOF катализатора увеличивается в 7 раз вследствие формирования наночастиц палладия с увеличенной электронной плотностью на графитоподобных азотных центрах и присутствия на углеродной поверхности доминирующих аминогрупп. Полученный катализатор позволяет получать водород с производительностью по водороду 200 л/ч на 1 г Pd и селективностью 99.4%.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ (грант № 17-73-30032).

Спектроскопия когерентного антистоксового рассеяния света как эффективный метод для визуализации графена и углеродных нанотрубокО.Г. Поддубская¹, С.А. Максименко¹, Н.А. Небогатикова², И.В. Антонова^{2,3}¹Институт ядерных проблем БГУ, ул. Бобруйская 11, 220006, Минск, Беларусь²Институт физики полупроводников им. А.В.Ржанова СО РАН, пр-т Лаврентьева 13, 630090, Новосибирск, Россия³Новосибирский государственный технический университет, пр-т К. Маркса 20, 630073, Новосибирск, Россия

paddubskaya@gmail.com

DOI: 10.26902/Graphene-23-011

Благодаря высокой чувствительности и химической селективности, пространственному разрешению и высокой скорости сканирования, спектроскопия когерентного антистоксового рассеяния света (КАРС) занимает особое место при исследовании нелинейных свойств нанообъектов и открывает принципиально новые возможности для их визуализации [1]. Как известно, форма линий в КАРС спектре, главным образом, определяется соотношением нерезонансного вклада, обусловленного электронными переходами, и резонансного вклада, обусловленного переходами между колебательными уровнями в системе [2]. В рамках данной работы было показано, что для одностенных углеродных нанотрубок (ОУНТ), при возбуждении вблизи электронного резонанса наблюдается сильный КАРС сигнал, при этом лоренцевский профиль G моды ($\sim 1585 \text{ см}^{-1}$) определяется резонансным вкладом. В случае графена вклад нерезонансного фона преобладает и вблизи G моды ($\sim 1590 \text{ см}^{-1}$) наблюдается симметричный «провал» (антирезонанс) [3], интенсивность которого линейно зависит от количества слоев графена. Варьируя мощность лазерного излучения в диапазоне от 1 до 200 мВт определены оптимальные параметры для анализа нелинейных свойств рассматриваемых углеродных структур. Возможность регистрировать интенсивный КАРС сигнал на пучках ОУНТ малого диаметра открывает дополнительные возможности для анализа пространственного распределения таких частиц в полимерной матрице. При этом, особенности спектров графена и ОУНТ позволяют на практике разделить вклад таких частиц в композиционных материалах.

[1] Wang Y. et al. // Adv. Opt. Photon. 2011. V. 3. P. 1-52.

[2] Limonov M.F. et al. // Nature Photonics. 2017. V. 11, № 9. P. 543-554.

[3] Lafetá L. et al. // Nano Lett. 2017. V. 17. P. 3447-3451.

Теоретическое моделирование наноструктур, формирующихся внутри углеродных нанотрубок

Д.В. Рыбковский^{1,2}, С.В. Лепешкин^{1,2,3}, А.А. Михайлова^{1,2}, В.С. Батулин^{1,2}, А. Impellizzeri⁴,
С.Р. Ewels⁴, А.Р. Оганов¹

¹Сколковский институт науки и технологий, Большой бульвар д.30, стр.1, 121205 Москва, Россия

²Институт общей физики им. А.М. Прохорова РАН, ул. Вавилова, д.38, 119991 Москва, Россия

³Институт геохимии и аналитической химии им. В.И. Вернадского РАН, ул. Косыгина, д.19, 119991 Москва, Россия

⁴Université de Nantes, CNRS, Institut des Matériaux Jean Rouxel, IMN, F-44000 Nantes, France
D.Rybkovskiy@skoltech.ru

DOI: 10.26902/Graphene-23-012

Заполнение внутренних каналов углеродных нанотрубок (УНТ) различными веществами позволяет модифицировать свойства исходных УНТ, а также формировать уникальные одномерные структуры, которые не могут существовать в свободном виде. Экспериментальные методы исследования таких одномерных систем зачастую не дают возможности однозначно определить их атомное строение, поэтому распространенным способом изучения таких структур является квантовохимическое моделирование с использованием алгоритмов глобальной оптимизации атомной геометрии.

Моделирование наносистем, формирующихся во внутренних каналах УНТ, имеет ряд особенностей, связанных с наличием внешнего пространственного ограничения для инкапсулированного материала, несоразмерностью УНТ и внутренней структуры, а также переносом заряда между углеродными стенками и атомами заполнителя.

В докладе представлены методы и подходы, разработанные авторами для моделирования таких наноструктур. Приводятся результаты теоретических исследований одномерных и нульмерных структур фосфора, формирующихся внутри УНТ и в свободном виде. Показано, что внутри УНТ с диаметрами 1.6–2.9 нм, наиболее выгодной модификацией фосфора является нитевидный красный фосфор [1]. Представлена зависимость структуры одномерного фосфора от диаметра нанотрубки. При исследовании нанокластеров фосфора P_n ($n = 2-50$) было выявлено, что наиболее устойчивые кластеры с $n > 16$ имеют продолговатую форму и могут быть представлены в виде последовательности структурных фрагментов, соединенных двухатомными перемычками [2]. Было показано, что в области наномасштабов нитевидные структуры являются более устойчивыми, чем любые другие аллотропы фосфора.

Хорошее согласие полученных теоретических результатов с экспериментальными данными показывает, что численное моделирование является надежным методом определения атомной геометрии сложных наноструктур.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант № 22-22-00555)

<https://rscf.ru/project/22-22-00555/>

[1] Rybkovskiy D.V., Koroteev V.O., Impellizzeri A. et. al. // ACS Nano. 2022. V. 16. P. 6002-6012.

[2] Rybkovskiy D.V., Lepeshkin S.V., Baturin V.S. et. al. // Nanoscale. 2023. V. 15, № 3. P. 1338-1346.

Оптический сенсор на основе углеродных нанотрубокГ.С. Бочаров¹, А.В. Елецкий¹, М.А. Зверев¹, А.К. Сарычев² С.Д. Федорович¹¹Национальный исследовательский Университет МЭИ, 111250

Красноказарменная ул. д. 14. Москва. Россия

²Институт теоретической и прикладной электродинамики РАН 125412

Ижорская ул. 13. Москва. Россия

eletskaa@mail.ru

DOI: 10.26902/Graphene-23-013

Предложена и проанализирована концепция оптического сенсора на основе углеродных нанотрубок. Согласно этой концепции, информация о химическом составе исследуемого материала содержится в спектре комбинационного рассеяния (КР) молекул, составляющих этот материал. Для усиления сигнала КР используется явление SERS (усиление сигнала КР проводящими наночастицами), где в качестве проводящих наночастиц используются углеродные нанотрубки. Основу сенсора составляет оптический волновод, поверхность которого покрыта тонким слоем полимерного материала с присадкой углеродных нанотрубок. Волновод вводится в исследуемую область устройства или живого организма. С целью получения сигнала КР по волноводу направляется лазерный луч, взаимодействие которого с исследуемым веществом в присутствии углеродных нанотрубок приводит к формированию спектра КР исследуемого вещества, который несет информацию о его химическом составе. Рассматриваемый сенсор предполагается использовать в медицине для диагностики внутренних заболеваний, а также в технологиях для удаленного контроля химического состава примесей. В докладе представлены результаты исследования взаимодействия молекул, находящихся на поверхности оптического волновода, покрытого полимером с присадкой углеродных нанотрубок. Возможность усиления сигнала КР с помощью углеродных нанотрубок была продемонстрирована недавно в работе [1]. Описанная концепция сенсора защищена патентом [2].

Работа выполнена в рамках Госзадания No. FSWF-2023-0016.

[1] Елецкий А.В., Сарычев А.К., Богинская И.А. и др. // Доклады РАН. 2018. Т. 483, № 5. С. 502-505.

[2] Афанасьев В.П., Бочаров Г.С., Елецкий А.В., Захаренков А.В., Сарычев А.К. Патент: Волоконно-оптический датчик вещества. № 2 731 036. МПК G01N 21/17 (2006.01). B82B 1/00 (2006.01). СПК G01N 21/7703 (2020.02). Дата подачи заявки: 30.10.2019. Опубликовано: 28.08.2020 Бюл. № 25

Применение различных типов углеродных наноматериалов для газовой сенсорики

А.Г. Баннов, С. Кумар, В.В. Головахин

Новосибирский государственный технический университет, 630073,

пр. К. Маркса 20, Новосибирск, Россия

Bannov_a@mail.ru

DOI: 10.26902/Graphene-23-014

Детектирование опасных газов в химической промышленности, медицине и защите окружающей среды является серьезной проблемой. Это обусловлено тем, что воздействия таких газов даже при низких концентрациях могут вызвать заболевания и даже смерть. Одним из таких газов является диоксид азота (NO₂). Этот газ опасен тем, что провоцирует развитие бронхита и воспаления легких. Поэтому проблема разработки эффективного метода детектирования опасных и токсичных газов в воздухе является актуальной [1–4].

Как правило, традиционные газовые сенсоры реализуются в виде полупроводниковых датчиков на основе оксидов металлов, которые работают при высоких температурах (200–350 °С), и это требует больших затрат энергии. Поэтому создание сенсоров, работающих при комнатной температуре, является актуальной задачей для разработки мобильных устройств анализа газов, присутствующих в воздухе. Вышеперечисленные проблемы можно решить с помощью разработки новых активных материалов на базе графена, графеноподобных материалов, углеродных нанотрубок и композитов на их основе.

Работа выполнена при финансовой поддержке Госзадания Министерства науки и высшего образования (FSUN-2023-0008).

[1] Bannov A.G. et al. // Sensors. 2017. V. 17, №. 2. P. 320.

Легированные азотом углеродные нанотрубки для пьезоэлектрических наногенераторов

М.В. Ильина, О.И. Соболева, О.И. Ильин

*Южный федеральный университет, ул. Шевченко, 2, корпус Е, Таганрог, Россия
mailina@sfedu.ru***DOI: 10.26902/Graphene-23-015**

Идея преобразования механической энергии окружающей среды в электрическую энергию для питания маломощной электроники активно реализуется в ходе разработки пьезоэлектрических наногенераторов (ПЭНГ). Основной проблемой в этом направлении является поиск материалов, обладающих высокими значениями пьезоэлектрического отклика, упругости, прочности и нетоксичности. Ранее нами было установлено [1,2], что легированные азотом углеродные нанотрубки (N-УНТ), отвечают всем обозначенным требованиям и могут выступать в качестве функционального материала для создания ПЭНГ.

В рамках данной работы было установлено, что на пьезоэлектрические свойства N-УНТ существенное влияние оказывает нижний электрод, на котором выращиваются нанотрубки методом плазмохимического осаждения из газовой фазы в потоках ацетилена и аммиака. Данная зависимость обусловлена интенсивностью взаимодействия материала нижнего электрода с молекулами аммиака в процессе роста N-УНТ и, как следствие, разной степенью легирования выращенных нанотрубок. Экспериментальные исследования подтверждены результатами исследований N-УНТ методами рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии, силовой микроскопии пьезоотклика и термодинамическим анализом реакций, протекающих между электродом и молекулами аммиака и ацетилена. В результате было установлено, что максимальная степень легирования N-УНТ (до 14%) и высокий пьезоэлектрический модуль (до 49 пм/В) наблюдается на молибденовом нижнем электроде, что необходимо учитывать при разработке ПЭНГ на основе N-УНТ.

Исследование выполнено за счет гранта РФФИ № 22-79-10163, в ЮФУ.

[1] Il'ina M.V., Il'in O.I., Osotova O.I. et al. // Carbon. 2022. V. 190. P. 348-358

[2] Il'ina M.V., Soboleva O.I., Khubezov S.A. et al. // J. Low Power Electron. Appl. 2023. V. 13. P. 11.

Улучшение сенсорных свойств углеродных нанотрубок путем молекулярного допирования

В.И. Сысоев, С.А. Лаврухина, О.А. Гурова, Л.Г. Булушева, А.В. Окотруб
*Институт неорганической химии им. А.В. Николаева СО РАН, пр-т Академика
Лаврентьева, 3, Новосибирск, Россия*
sysoev@niic.nsc.ru

DOI: 10.26902/Graphene-23-016

Аллотропные модификации углерода, такие как углеродные нанотрубки (УНТ), крайне чувствительны к изменению зарядового состояния поверхности, что делает их отличными кандидатами для сенсоров с высокой чувствительностью. Нековалентная модификация является эффективным методом настройки физико-химических свойств УНТ. По сравнению с ковалентными методами, нековалентная стратегия обладает несколькими замечательными преимуществами. Это простая, универсальная методика, которая увеличивает концентрацию и подвижность носителей заряда и не приводит к образованию дефектов и существенным деформациям структуры. В настоящей работе показана возможность использования донорной молекулы тетрагидрофульвалена (ТТФ) и акцепторной молекулы тетрацианохинодиметана (TCNQ) в качестве молекулярных допантов для увеличения отклика сенсора на основе УНТ на NO_2 и NH_3 , соответственно. Полное покрытие углеродного материала органическими молекулами делает их рецепторным слоем при детектировании молекулы аналита. Адсорбция аммиака или диоксида азота на поверхности гибридного материала приводит к переносу заряда между слоем ТТФ(TCNQ) и адсорбированной молекулой, что в свою очередь изменяет перенос заряда между ТТФ(TCNQ) и углеродной нанотрубкой. Наиболее сильное перераспределение в системе наблюдается, когда адсорбированная молекула и органический допант имеют противоположное влияние. Полученный подход может быть интересен как при разработке сенсорных материалов, так и при проектировании сенсорных массивов для обнаружения и идентификации компонентов в многокомпонентном газе смеси.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ (грант № 21-7300229)

Графеновые квантовые точки - новый низкоразмерный материал на основе графена
 Е.Д. Образцова^{1,2}, П.В. Федотов^{1,2}, А.Е. Томская^{1,2}, Darwin Kurniawan³, Wei-Hung Chiang³
¹Институт общей физики им.А.М. Прохорова РАН, 119991 Москва, ул.Вавилова.38, Россия
²Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет), 141707 г. Долгопрудный, Моск. обл. Институтский пер. 9, Россия
³National Taiwan University of Science and Technology, Taipei, 10607, Taiwan

DOI: 10.26902/Graphene-23-017

0-мерные структуры на основе графена - графеновые квантовые точки (ГКТ) с регулируемыми размерами, синтезированы простым и удобным (используемым при атмосферном давлении), методом - за счет микроплазменного преобразования натурального биосовместимого материала – хитозана. Такой быстрый синтез не нуждался в сильных кислотах и основаниях, ядовитых растворителях и химикатах, а также в высокотемпературных и вакуумных условиях [1]. Контроль размеров и структуры ГКТ произведен методами оптической спектроскопии.

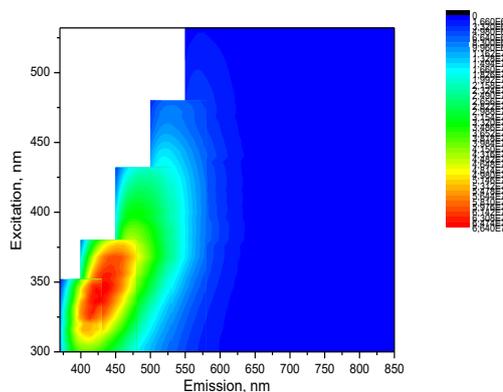


Рис.1. Карта фотолюминесценции («возбуждение-эмиссия») графеновой квантовой точки.

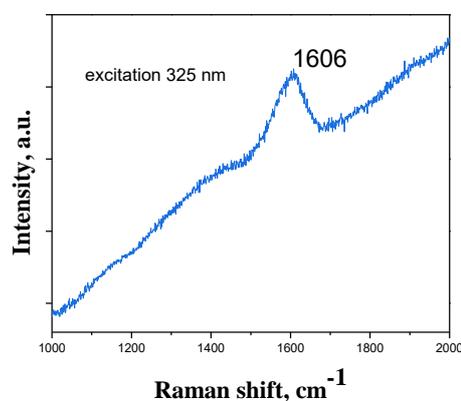


Рис.2. Спектр КР графеновой квантовой точки.

Несмотря на то, что разговор об углеродных квантовых точках ведется давно, ГКТ с кристаллическим графеновым ядром получены недавно [2]. В данной работе существование точек с диаметром 4-6 нм подтверждено методом просвечивающей электронной микроскопии высокого разрешения. Для точек различного диаметра получены карты фотолюминесценции («возбуждение-эмиссия») с размерно-зависимым положением максимума резонансной ФЛ. Размерно-зависимые сигналы комбинационного рассеяния (КР) света селективно регистрировались при возбуждении квантами He-Cd лазера (325 нм), энергия которых была выше максимума пика ФЛ. Возможность такой схемы возбуждения обусловлена 0-мерной природой материала. Яркая ФЛ ГКТ использовалась для индикации присутствия и оценки количества тяжелых металлов в водных растворах. ГКТ использовались также в качестве фильтров для очистки суспензий от тяжелых металлов [3]. ГКТ с добавлением азота использовались для выявления белков в водных суспензиях. При различных уровнях pH в растворе регистрировались различные биомолекулы (глюкоза, фруктоза, тирозин, глицин и т.д.) Такой подход может быть эффективно использован для проведения многочисленных медицинских анализов.

Работа выполнена при поддержке РФФИ, проект-21-72-20050.

[1] Kurniawan D., Chiang W.-H. // Carbon. 2020. V. 167. P. 675-684.

[2] Kurniawan D., Rahardja M.R., Fedotov P.V. et.al. // Chem.Eng. Journ. 2023. V. 451. 139083.

[3] Chen Y.-Y., Kurniawan D., Mousavi S.M., et.al. // Journ. of Materials Chemistry. 2022. V. 10. P. 9654-966.

Графеновый электронный текстиль

С.А. Смагулова, Ф.Д. Васильева, З.И. Евсеев

*Северо-Восточный федеральный университет им. М.К. Аммосова, 677000,
Белинского, 58, г. Якутск, Россия
smagulova@mail.ru*

DOI: 10.26902/Graphene-23-018

В настоящее время большой интерес представляет разработка наноэлектронных приборов и устройств для носимой электроники, для которой создание проводящего электронного текстиля, обладающего сенсорными свойствами, а также выступающего в качестве подложки для создания различных гибких приборных устройств, является актуальным и перспективным научным направлением. Графен и его производные являются самыми подходящими материалами для создания электронного текстиля.

В данной работе получены и исследованы свойства проводящих электронных тканей на основе хлопка и нейлона, пропитанные восстановленным оксидом графена. Показано, что предварительное нанесение на текстиль бычьего сывороточного альбумина улучшило адгезию оксида графена. После восстановления оксида графена в парах гидразина получены проводящие ткани с сопротивлениями 350 Ом/□ для нейлоновой ткани и ~ 10³ Ом/□ для хлопка. Созданы электронные ткани с использованием слабо окисленного графена (степень окисления ~ 20%) с последующим восстановлением в водном растворе Na₂S₂O₄ без бычьего сывороточного альбумина. Показано, что графеновая текстиль, полученная с использованием суспензии слабо окисленного графена в 20 раз устойчивее к стирке, чем ткани, пропитанные оксидом графена. На основе полученных проводящих текстилей созданы сенсоры пульса сердечного биения человека, сенсоры температуры, изгиба и влажности. Показано, что чувствительность тканевых сенсоров температуры зависит от содержания атомов кислорода в слабо окисленном графене, в то время как у сенсоров пульса нет такой зависимости.

Работа выполнена при финансовой поддержке Гос. задания МОН № FSRG–2023–0026.

Ультравысокая чувствительность неинвазивных гибких сенсоров глюкозы, полученных из композитных слоев графен-PEDOT:PSS 2D печатью**И.В. Антонова^{1,2}, М.Б. Шавелкина³, А.И. Иванов¹, Д.А. Потеряев^{1,2}, А.А. Бузмакова^{1,2}**¹*Институт физики полупроводников им. А.В. Ржанова СО РАН, Новосибирск, Россия*²*Новосибирский государственный технический университет, Новосибирск, Россия*³*Объединенный институт высоких температур РАН, Москва, Россия**antonova@isp.nsc.ru***DOI: 10.26902/Graphene-23-019**

Формирование композитов на основе графена с незначительными добавками различных частиц или веществ, как известно, позволяет существенно менять структуру и свойства получаемых материалов. В данной работе мы исследовали влияние добавок проводящего полимера PEDOT:PSS на свойства слоев графена. Тестовые структуры создавались с использованием 2D принтера, что позволяло создавать слои толщиной единицы нанометров. Добавление проводящего полимера PEDOT:PSS к графену даже в незначительной концентрации (~10–3 масс.%) приводило к значительному улучшению гибкости получаемых структур и, при определенных условиях, увеличению проводимости композитных слоев. Показано, что композитные ультратонкие пленки графен: PEDOT:PSS на бумаге или на ткани могут быть использованы для создания гибких неинвазивных сенсоров глюкозы. Найдено, что отклик сенсора пропорционален концентрации глюкозы в крови и может достигать 6 порядков по величине тока благодаря адсорбции компонентов пота во время носки сенсора на коже. Ультравысокая чувствительность сенсора определяется возможностью получать проводящие слои композита ультрамалой толщины. Тонкие (до 1.5 нм) частицы графена располагаются на подложке вертикально, образуя развитую поверхность с высокой адсорбционной способностью по отношению к глюкозе.

Благодарности: Авторы благодарны за поддержку фонду РФФ, грант № 22-19-00191.

Особенность восстановления оксида графена лазерным излучением видимого диапазона: влияние фототермического и фотохимического механизмов

М.И. Фаткуллин¹, Д.Л. Чешев¹, А.А. Аверкиев¹, Г. Мурастов², А. Горбунова¹,
П.С. Постников¹, Р.Д. Родригес¹, Е.С. Шеремет¹

¹Томский политехнический университет, пр. Ленина 30, 634050 Томск, Россия

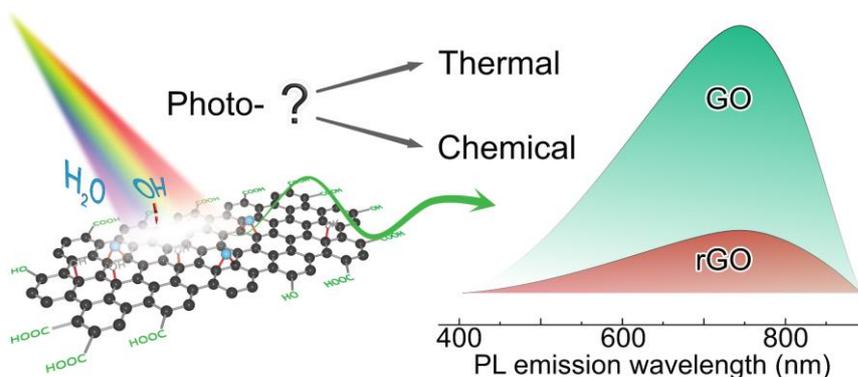
²Montanuniversität Leoben, Franz Josef-Straße 18, 8700 Leoben, Austria

esheremet@tpu.ru

DOI: 10.26902/Graphene-23-020

Лазерное восстановление оксида графена (ОГ) активно исследуется в связи с его потенциалом в создании сложных структур для носимых устройств, гибкой электроники и фундаментального понимания свойств графена в целом. Одной из нерешенных проблем

в изучении лазерного восстановления ОГ является оценка влияния фототермического и фотохимического вкладов в процесс восстановления, а также точное измерение температуры в режиме реального времени. Используя рамановскую термометрию, мы смогли определить температуру во время лазерного восстановления используя кремниевые нанотрубки в качестве нанотермометров, а измерения методами фотолюминесценции и электрической атомно-силовой микроскопии помогли оценить степень восстановления ОГ в микро- и наномасштабах. Наши результаты показывают существенную разницу между модификацией ОГ под воздействием лазерного излучения в видимом диапазоне и при нагревании, которая объясняется фотохимическим удалением –ОН групп во время лазерного восстановления. Проведенное исследование раскрывает особенности механизма лазерного восстановления ОГ в видимом диапазоне и предоставляет новые возможности для более гибкой модификации ОГ с целью применения в разработке различных электронных устройств.



Работа выполнена при поддержке гранта РФФ № 22-12-20027, <https://rscf.ru/project/22-12-20027/> и финансовой поддержке администрации Томской области.

Гибкие 2D и 3D структуры на основе графена для ТГц фотоники
Н.И. Волынец¹, О.Г. Поддубская¹, В.И. Сысоев², Д.В. Городецкий², Л.Г. Булушева²,
А.В. Окотруб²

¹Лаборатория НаноЭлектроМагнетизма, Институт ядерных проблем БГУ,
ул. Бобруйская 11, 220006, Минск, Беларусь

²Институт неорганической химии им. А.В. Николаева СОРАН, пр. Академика
Лаврентьева 3, 630090, Новосибирск, Россия
Nadezhda.Volynets@gmail.com

DOI: 10.26902/Graphene-23-021

Уникальные возможности, которые открывает терагерцовый частотный диапазон (0.1–10 ТГц) в спектроскопии, в медицине и биологии [1], в системах неразрушающего контроля, мониторинга состояния атмосферы [2], передачи данных [3] и т.д. стимулируют быстрый рост числа исследований в этом направлении, а также поиск новых подходов для эффективного манипулирования электромагнитным излучением (развитие фильтров, поляризаторов, модуляторов, защитных экранов и т.д.). В работе представлен анализ электромагнитного отклика 3D структур, полученных методом CVD с использованием Ni/Cu структур в качестве шаблона, а также периодических 2D структур на основе тонких пленок графена/фторированного графена. Было показано, что метаповерхности на основе тонких пленок графена/фторированного графена можно рассматривать в качестве материалов для создания гибких поляризаторов, электромагнитным откликом которых можно управлять за счет возбуждения «темных» мод в таких структурах. С другой стороны, анализ частотных зависимостей коэффициента отражения (R) и коэффициента прохождения (T) углеродных пен со средним размером пор порядка 300–400 мкм позволяет сделать вывод, что такие материалы обеспечивают поглощение на уровне 100% в ТГц области частот. При этом, тонкие пленки многослойного графена в качестве углеродного скелета в сочетании с гибкими полимерами наряду с эффективностью обеспечивают легкость и гибкость рассматриваемых поглотителей.

Работа выполнена при финансовой поддержке БРФФИ Ф23МЭ-023.

[1] Cassar Q. et al. // Sci. Rep. 2021. V. 11, № 1. P. 6457.

[2] Leitenstorfer A. et al. // J. Phys. D: Appl. Phys. 2023. V. 56. P., 223001.

[3] Song H.-J. and Lee N. // IEEE Trans. THz Sci. Tech. 2022. V. 12, №. 2. P. 105-117.

Photoluminescence enhancement from Single-Walled Carbon Nanotubes covered by SiO₂

A.E. Goldt, P. M. Kalachikova, S. Dozmorov, Yu. G. Gladush, A.G. Nasibulin
Skolkovo Institute of Science and Technology, Nobel 3, 121205, Moscow, Russia
a.goldt@skoltech.ru

DOI: 10.26902/Graphene-23-022

Semiconducting single-walled carbon nanotubes (Sc-SWCNTs) show remarkable electronic and optical properties, such as high charge carrier mobilities and diameter-dependent NIR photoluminescence (PL). However, Sc-SWCNTs have a very low quantum yield [1], due to exciton quenching on defective nanotubes' sites [2] because of free exciton diffusion, essentially limits the practical application of SWCNTs light emitters.

To overcome the relatively low quantum efficiency of SWCNTs and prevent any possible damage we grew SiO₂ protection layers on the surface of individual CNTs by Stober method of TEOS hydrolysis. We observed an increase in the intensity of the PL signal with the thickness of the SiO₂ layer, indicating an improvement in the quantum efficiency of the SWCNTs.

The Sc-SWCNT dispersions exhibited good stability, and after preparing nanotube films by spin coating, the PL signal remained intact. These findings suggest that the SiO₂ layers effectively isolate the individual nanotubes from each other, preventing any loss of the luminescence signal.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ 22-13-00436

[1] Miyauchi Y. // J. Mater. Chem. C. 2013. V. 1. P. 6499–65212.

[2] Hertel T., Himmelein S., Ackermann T. et al. // ACS Nano. 2010. V 4. P. 7161-7168.

Формирование квазидвумерных графеноподобных слоев на поверхности полупроводников

В.А. Голяшов^{1,2,3}, Н.Ю. Соловова^{1,2}, Д.В. Ищенко¹, А.Э. Климов¹, О.Е. Терещенко^{1,2,3}

¹ИФП СО РАН, пр. Лаврентьева, 13, Новосибирск, 630090, Россия

²НГУ, ул. Пирогова, 2, Новосибирск, 630090, Россия

³ЦКП «СКИФ», 630559, Кольцово, пр. Никольский, 1
teresh@isp.nsc.ru

DOI: 10.26902/Graphene-23-023

С момента создания графена наблюдается возрастающий интерес к исследованиям двумерных и квазидвумерных электронных систем с заданными и управляемыми свойствами. Возможность использования графена в спинтронике до сих пор остается под вопросом ввиду малой величины спин-орбитального расщепления электронных состояний. Альтернативным подходом является создание графеноподобных систем из атомов с большим атомным номером и, следовательно, сильным спин-орбитальным взаимодействием, а также на подложках, являющихся топологическими трехмерными изоляторами. Одним из перспективных элементов для наблюдения спин-зависимых эффектов является висмут, который, как было предсказано расчетами из первых принципов, может проявлять и свойства двумерного топологического изолятора.

Нами изучена электронная и спиновая структура интерфейса Bi/InAs(111)A методом фотоэмиссии с угловым и спиновым разрешением (SARPES). Эксперименты по адсорбции висмута на поверхность InAs(111)A-(2x2) проводились как при комнатной, так и повышенных температурах. Осаждение Bi при комнатной температуре приводило к эпитаксиальному росту с образованием упорядоченной гексагональной фазы и формированию спин-поляризованных состояний на уровне Ферми. Наличие Bi-индуцированных состояний в щели InAs с линейной дисперсией аналогично графену с двумя важными отличиями: состояния спин-поляризованы и расположены в точке Г зоны Бриллюэна. Осаждение Bi при повышенной температуре подложки приводит к формированию структуры InAs(111)A-(2√3x3)-Bi. Электронная структура поверхности InAs(111)A-(2√3x3)-Bi представляет собой набор спин-поляризованных конусов в Г и К точках зоны Бриллюэна, содержащих щель 100-150 мэВ. Наблюдаемую дисперсию можно интерпретировать как графен-подобное состояние Дирака с щелью, что может означать наличие защищенных краевых состояний, т.е. случай 2D топологического изолятора.

Второй изученной системой является кристаллический топологический изолятор (111) Pb_{1-x}Sn_xTe:In, на поверхности которого, при определенных условиях прогрева, возникают графеноподобные состояния, связанные с формированием слоя In-Te вследствие сегрегационных процессов. Полученные результаты сравниваются с другими графеноподобными материалами.

**Основы технологии синтеза многостенных углеродных нанотрубок
в реакторах с псевдооживленным слоем**В.Л. Кузнецов¹, С.И. Мосеев¹, О.С. Рабинович²¹Институт катализа им. Г.К. Борескова РАН, Новосибирск, Россия²Институт тепло- и массообмена им. А.В. Лыкова, НАН Беларуси, Минск, Беларусь
kuznet@catalysis.ru**DOI: 10.26902/Graphene-23-024**

В ИК СО РАН выполнен полный цикл работ для создания укрупненной технологии каталитического синтеза многостенных углеродных нанотрубок (МУНТ) в реакторах с псевдооживленным слоем (ПС). В докладе будут представлены материалы описывающие:

1. Разработку высокоэффективных катализаторов, обеспечивающих высокие выходы, узкое распределение МУНТ по диаметру, их низкую дефектность.
2. Исследования формальной кинетики роста МУНТ на Fe-Co катализаторах в том числе *in situ* активации катализатора в реакторе, дезактивации в течение синтеза, влияние давления этилена, температуры синтеза, изменения объёма.
3. Разработку нестационарной модели каталитического синтеза МУНТ в ПС в условиях резкого увеличения его объема в ходе синтеза – оптимизацию режимов периодической выгрузки продукта и загрузки катализатора, исследование динамики изменения со временем характеристик процесса в таких режимах, определение оптимальных управляющих параметров циклических режимов работы реактора, позволяющих достигать максимальной производительности синтеза, высокой конверсии газообразного источника углерода и высокой чистоты получаемых МУНТ.
4. Усовершенствование нестационарной модели с учетом тепловых эффектов при синтезе МУНТ (тепловой эффект реакции роста МУНТ существенно влияет на тепловое поле даже в реакторах с малым диаметром, что связано с крайне низкой теплопроводностью аэрогелеобразных агломератов МУНТ), представляющих основные блоки псевдооживленного слоя. Оценка профиля распределения мощности нагревательных элементов по высоте ПС.
5. Решение проблем потери гомогенности ПС, связанных с образованием крупных комков МУНТ при их каталитическом синтезе в реакторе с ПС (влияние типа катализатора, морфологии первичных агломератов растущих МУНТ, их когезионных свойств) с точки зрения влияния свойств катализатора и параметров процесса синтеза (числовая плотность центров роста, контроль газовых потоков).

Исследование влияния ионной имплантации Ag на получаемые электрохимические характеристики углеродных наностенок

С.А. Евлашин¹, Ф.С. Федоров¹, Ю.В. Бондарева¹, О.Н. Дубинин¹, Д.О. Потапов^{1,2},
Н.Д. Орехов^{1,2}

¹Сколковский институт науки и технологий, Большой бульвар 30 стр. 1, Москва, Россия

²МФТИ, Институтский пер., 9, Долгопрудный, Россия

s.evlashin@skoltech.ru

DOI: 10.26902/Graphene-23-025

Углерод – один из самых распространённых материалов, который используется для создания современных источников тока. Для увеличения удельных характеристик источников тока могут применяться несколько методов. Одним из подходов является нанесение других материалов, например, оксидов металлов, которые показывают более высокую каталитическую активность [1]. Вторым подходом является легирование углеродных материалов гетероатомами других химических элементов [2]. Данный подход приводит к увеличению стоимости и веса источников тока и может быть реализован непосредственно при синтезе материалов. Третьим подходом является создание дефектов в углероде, которые также могут влиять на получаемые характеристики.

В данной работе в качестве углеродного материала были выбраны вертикально ориентированные графеновые слои (углеродные наностенки), которые обладают большой удельной поверхностью и представляют интерес для реализации суперконденсаторов [3]. Для изменения дефектности структур была сделана ионная имплантация аргона. Обнаружено, что доза имплантации 10^{14} ионов/см² приводит к увеличению электрохимической ёмкости в несколько раз. При данной дозе имплантации количество дефектов в структуре существенно возрастает. Дальнейшее увеличение дозы имплантации приводит к ухудшению электрохимических характеристик. Для объяснения полученных результатов было проведено молекулярно-динамическое моделирование.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант № 22-73-10198

https://www.rscf.ru/prjcard_int?22-73-10198)

[1] Zhang L. L., Zhou R., Zhao X. S. // J. Mater. Chem. 2010. V. 20, № 29. P. 5983-5992.

[2] Lin T. et al. // Science. 2015. V. 350, № 6267. P. 1508-1513.

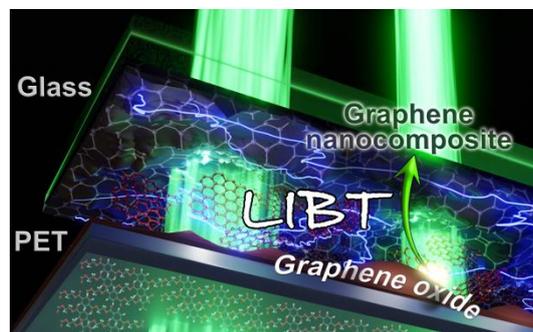
[3] Evlashin S. A. et al. // J. Phys. Chem. Lett. 2020. V. 11, № 12. P. 4859-4865.

Unlocking Glass Graphene Electronics via Laser Processing

R. D. Rodriguez, M. Fatkullin, A. Garcia, A. Lipovka, E. Sheremet
 Tomsk Polytechnic University, Lenin ave. 30, Tomsk, Russia, 634050.
 raul@tpu.ru

DOI: 10.26902/Graphene-23-026

Glass electronics inspire the emergence of smart functional surfaces. To evolve this concept to the next level, developing new strategies for scalable, inexpensive, and electrically conductive glass-based robust nanocomposites is crucial. Graphene is an attractive material as a conductive filler; however, integrating it firmly into glass without the need for energy-intensive sintering, melting, or harsh chemicals has not been possible until now. In this contribution, we will discuss a new process to obtain



a conductive (160 Ohm sq^{-1}) and resilient nanocomposite between glass and graphene *via* single-step laser-induced backward transfer (LIBT) [1]. Beyond conventional LIBT involving photonic-induced mass transfer [2], our approach simultaneously drives chemical transformations in glass, including silicon compound formation and graphene oxide (GO) reduction. These processes occur together with the generation and transfer of the highest-quality laser-reduced GO reported to date and its integration into glass. Our nanocomposite was further functionalized with silver to achieve a highly sensitive (10^{-9} M) dual-channel plasmonic optical and electrochemical sensor. Besides the electrical circuit demonstration, we show an electrothermal heater that can maintain temperatures above $300 \text{ }^\circ\text{C}$ and continuously operate for over 48h.

The work was supported by RFBR and DFG, project number 21-53-12045.

[1] Rodriguez R.D., Fatkullin M., Garcia A. et al. // Adv. Mater. 2022. V. 34. P. e2206877.

[2] Praeger M., Papazoglou S., Pesquera A. et al. // Appl. Surf. Sci. 2020. V. 533. P. 147488.

Влияние условий хранения на старение водного раствора оксида графена

Ю.В. Бондарева, С.А. Евлашин

*Сколковский институт науки и технологии, Большой бульвар 30 стр. 1, Москва, Россия
j.bondareva@skoltech.ru***DOI: 10.26902/Graphene-23-027**

Открытие графена в 2004 году привлекло внимание ученых со всего мира, а уникальные электронные, оптические, тепловые и механические свойства графена открыли возможности для практических и коммерческих применений этого материала в различных отраслях науки и техники. Наряду с графеном, активно развивается получение других углеродных производных, одним из них является оксид графена, представляющий собой химически модифицированный графен, содержащий различные кислородные функциональные группы, такие как эпоксиды, спирты и карбоновые кислоты [1]. Наличие функциональных групп позволяет проводить дополнительную модификацию поверхности для новых применений.

Свойства оксида графена могут сильно варьироваться в зависимости от метода, которым раствор был получен. Особенности в свойствах графена могут быть связаны с методом хранения и условиями хранения. При комнатной температуре оксид графена метастабилен и начинает разлагаться уже при 50 °С [2, 3]. Более того, оксид графена легко поглощает влагу из воздуха, что также влияет на свойства [4]. В данной работе нами было проведено исследование старения водного раствора оксида графена при длительном хранении. Характеризация растворов была проведена с использованием оптико-физических методов, определен химический состав свежего оксида графена и оксида графена хранившегося при разных условиях более месяца. Выработаны рекомендации по хранению приготовленных растворов оксида графена.

*Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ (грант № 22-73-10198
https://www.rscf.ru/prjcard_int?22-73-10198)*

[1] Acik M. et al. // J. Phys. Chem. C. 2011. V. 115, № 40. P. 19761-19781.

[2] Eigler S. et al. // Chem. Mater. 2012. V. 24, №. 7. P. 1276-1282.

[3] Kumar P.V. et al. // Nature Chem. 2014. V. 6, №. 2. P. 151-158.

[4] Li C, Lu Y, Yan J, et al // R. Soc. Open Sci. 2021. V. 8. P. 202309.

Электронные транспортные свойства низкоразмерных углеродных материалов со структурным ближним порядком

А.А. Белослудцева, Н.Г. Бобенко, В.Е. Егорушкин
ИФПМ СО РАН, Академический 2/4, Томск, Россия
anna.bel@ispms.ru

DOI: 10.26902/Graphene-23-028

В структуре низкоразмерных углеродных материалов в процессе роста и постобработки образуются дефекты, обусловленные осаждением на поверхность чужеродных атомов. Атомы другого сорта при малой концентрации (c) до 3–5% – примеси, а при $c > 5\%$ формируют области ближнего порядка, что соответствует экспериментальным исследованиям структуры [1,2]. Расчет параметров ближнего порядка для МУНТ, одно-, двухслойного АВ и турбостратного графена при их функционализации проводился с учетом числа слоев, их ориентации, концентрации и положений адатомов. Методом температурных функций Грина было исследовано влияние ближнего порядка на изменение электронных транспортных свойств углеродных наноматериалов [1,2]. Показано, что ближнеупорядоченные структурные перестройки приводят к увеличению плотности электронных состояний (ПЭС) на уровне Ферми при расслоении и открытию в ПЭС щели ~ 1.4 эВ при упорядочении. Новый ближний порядок определяет температурную зависимость электросопротивления, увеличение электронного вклада до 15% в теплоемкость и теплопроводность наноматериалов при низких температурах. Данные корреляции важны при использовании углеродных наноматериалов в проводящих композитах, датчиках, производстве, хранении энергии и др.

Работа выполнена в рамках государственного задания ИФПМ СО РАН, номер FWRW-2022-0002.

- [1] Belosludtseva A.A., Bobenko N.G., Egorushkin V.E. et al. // Synth. Met. 2021. V. 280, P. 116866.
[2] Bobenko N., Chumakov Yu., Belosludtseva A. // Appl. Sci. 2022. V. 12, № 9. P. 4109.

Влияние электрохимической обработки на структуру одностенных углеродных нанотрубок и их заполняемость

М.О. Булавский, Ф.С. Федоров, А.Г. Насибулин

*Сколковский Институт Науки и Технологий, Нобеля 3, 121205, Москва, Россия
mikhail.bulavskiy@skoltech.ru***DOI: 10.26902/Graphene-23-029**

За последние два десятилетия внушительное количество исследований было посвящено разработке синтеза и изучению свойств заполненных одностенных углеродных нанотрубок (ОУНТ). Благодаря комбинации свойств ОУНТ со свойствами заполняющего материала, возможно применение заполненных ОУНТ в различных областях - от накопления энергии и электрокатализа до наноэлектроники и магнитных материалов [1]. Методами молекулярной динамики было показано, что структура ОУНТ при заполнении растворами играет важное значение на эффективность заполнения [2]. Наиболее распространенные методы открытия каналов ОУНТ не отличаются высоким уровнем контроля окисления, необходимого для удаления шапок ОУНТ. Альтернативным методом открытия внутренних каналов может выступать электрохимическая обработка, поскольку позволяет тонко настроить продолжительность и «мощность» обработки (потенциал). В этой работе мы использовали электрохимическую обработку пленки ОУНТ для оценки влияния электродного потенциала на структуру ОУНТ. Мы показали, что максимальная заполняющая способность ОУНТ достигла 1895 м/см^2 при потенциале обработки 1.1 В. Эти условия соответствуют балансу между количеством открытых ОУНТ и структурными дефектами на их боковых стенках.

Работа выполнена при финансовой поддержке Совета по грантам Президента РФ (грант № НШ-1330.2022.1.3)

[1] Soldano C. // Prog. Mater. Sci. 2015. V. 69. P. 183-212.

[2] Noy A., Park H.G., Fornasiero F. et al. // Nanotoday. 2007. V. 2, №. 6. P. 22-29.

Single-walled carbon nanotube interactions with carbon nanotube fibers in a polymer matrix

H. A. Butt, D. V. Krasnikov, V. A. Kondrashov, A.G. Nasibulin
Skolkovo Institute of Science and Technology, Nobel 3, 121205, Moscow, Russia
hassaan.butt@skoltech.ru

DOI: 10.26902/Graphene-23-030

Carbon nanotubes (CNTs) are popular in scientific literature for use as additives for homogeneously dispersed polymer nanocomposites [1]. When single-walled carbon nanotubes (SWCNTs) are dispersed within polymers to create such nanocomposites, they become covered with a layer of the polymer, creating a physical barrier that contributes to contact resistance. Carbon nanotube fibers (CNTFs) are fiber-like macrostructures created through the densification and arrangement of CNTs [2]. They show high specific electrical and mechanical properties and display a degree of porosity which may be utilized for the measurement of electrical values for polymer nanocomposites [3]. Here, CNTFs are inserted into SWCNT/polymer nanocomposites to determine whether the microstructure of the CNTFs is conducive to reducing tunneling distance, increasing the physical contact between the dispersed SWCNTs and the CNTFs and providing an accurate and precise measurement of electrical properties. The CNTFs showed values which corresponded to, or were better than, surface-based measurement techniques and did so without a loss in mechanical performance.

Работа выполнена при финансовой поддержке ИИИ-1330.2022.1.3

- [1] Butt H.A. et al. // Compos. Struct. 2021. V. 259. № 1. P. 113244.
- [2] Zhilyaeva M.A. et al. // Carbon. 2019. V. 150. P. 69-75.
- [3] Rodriguez-Uicab O., Abot J.L., Aviles F. // Sensors . 2020. V. 20, № 11. P.3230.

Однослойные углеродные нанотрубки с красным фосфором в литий-ионных аккумуляторах: влияние поверхностного и инкапсулированного фосфора

А.А. Ворфоломеева, А.В. Окотруб, Л.Г. Булушева

*Институт неорганической химии им. А.В. Николаева СО РАН, пр-т Академика
Лаврентьева, 3, Новосибирск, Россия**vorfolomeeva@niic.nsc.ru***DOI: 10.26902/Graphene-23-031**

Однослойные углеродные нанотрубки (ОУНТ) обладают большой площадью поверхности, электропроводностью, механической прочностью и эластичностью и являются идеальными кандидатами для разработки композитных электродных материалов для литий-ионных аккумуляторов (ЛИА) [1]. Красный фосфор обладает очень высокой теоретической емкостью (2596 мАч/г), но имеет плохую электропроводность и значительно расширяется в объеме в результате электрохимической реакции с ионами лития [2]. В нашей работе мы изучаем влияние фосфора, расположенного на поверхности и/или внутри каналов ОУНТ на характеристики композитного материала в ЛИА [3].

В качестве темплата для конденсации красного фосфора использовались коммерческие ОУНТ (Tuball, OCSiAl) диаметром 1,6–2,9 нм с закрытыми или открытыми концами. Синтез проводили методом испарения-конденсации в вакуумированной ампуле при 800 °С. В условиях синтеза внутри открытых ОУНТ образуются фосфорные цепочки, при этом поверхность ОУНТ также покрывается красным фосфором, который окисляется при контакте с воздухом. Внешний фосфор эффективно удаляется водным раствором гидроксида натрия. Содержание фосфора в образцах только с внешним фосфором ОУНТ/Р, только внутренним фосфором Р@ОУНТ и обоими типами фосфора Р@ОУНТ/Р составляет 11, 8 и 16 ат.%, соответственно, по данным РФЭС.

Было обнаружено, что образец ОУНТ/Р обладает лучшими характеристиками в ЛИА, чем коммерческий красный фосфор, благодаря наличию проводящей сети ОУНТ. Создание композитных наноматериалов с внутренним фосфором почти вдвое увеличивает начальную кулоновскую эффективность и резко улучшает удельную емкость и стабильность электрода при циклировании. Получена превосходная стабильность Р@ОУНТ в течение 1000 циклов, связанная с синергетическим эффектом высокоемкого фосфора и проводящих ОУНТ, отсутствием неактивного окисленного фосфорного осадка на поверхности и наличием множественных каналов для диффузии лития.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ (грант № 22-13-00219).

[1] Khlobystov A.N. // ACS Nano. 2011. V. 5, № 12. P. 9306–9312.

[2] Marino C., Boulet L., Gaveau P. et al // J. Mater. Chem. 2012. V. 22. P. 22713–22720.

[3] Vorfolomeeva A.A., Stolyarova S.G., Asanov I.P. et al. // Nanomaterials. 2023. V. 13, № 1. P. 153.

Исследование бифункциональной активности электрокатализаторов на основе наночастиц оксидов MnFeNi и многослойных углеродных нанотрубокГ.В. Голубцов^{1,2}, М.А. Казакова¹, А.Г. Селютин¹, D.M. Morales³, W. Schuhmann³¹ИК СО РАН, пр. Лаврентьева 5, Новосибирск 630090²НГУ, ул. Пирогова 2, Новосибирск 630090³Ruhr University Bochum, Universitätsstr. 150, 44780 Bochum, Germany

ggv@catalysis.ru

DOI: 10.26902/Graphene-23-032

Создание электрокатализаторов, не содержащих драгоценных металлов, обладающих высокой активностью и стабильностью как в реакциях восстановления кислорода (РВК), так и в реакциях выделения кислорода (РОВ), остается одной из основных задач для разработки кислородных электродов в металл-воздушных батареях и обратимых топливных элементах. В данной работе был предложен новый подход для повышения бифункциональной активности кислородных электродов, основанный на синергетическом взаимодействии оксидных наночастиц активных в РОВ или РВК, объединенных в единую композицию с окисленными многослойными углеродными нанотрубками (МУНТ). Для этого методом пропитки по влагоемкости МУНТ были синтезированы триметаллические катализаторы, состоящие из Fe_{0.3}Ni_{0.7} оксидных частиц, характеризующихся «эталонной» активностью в РОВ, и оксида Mn, проявляющего высокую активность в РВК. Показано, что комбинация нескольких компонентов оказывает влияние как на структурные свойства образцов, так и на их электрокаталитические свойства. Так, наиболее активный триметаллический катализатор Mn_{0.5}(Fe_{0.3}Ni_{0.7})_{0.5}/МУНТ продемонстрировал существенно более низкую разность перенапряжений РВК/РОВ ($\Delta E = 0.73$ В) и лучшую селективность в отношении восстановления O₂ до OH- через путь переноса 4 электронов с выходом пероксидных частиц менее 10% [1]. Кроме того, оптимальная триметаллическая система показала лучшую стабильность, что имеет решающее значение для потенциальной практической реализации.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования РФ в рамках государственного задания Института катализа СО РАН (проект АААА-А21-121011390054-1)

[1] Morales D.M., Kazakova M.A., Dieckhöfer S. et al. // Adv. Funct. Mater. 2020. V. 30, № 6. P. 1905992.

Влияние внедрённых молекул на диэлектрические свойства фторированных графитовМ.А. Гребёнкина^{1,2}, Г.Н. Чехова¹, Д.В. Пинаков¹, Л.Г. Булушева¹, А.В. Окотруб¹¹ИИХ СО РАН, пр. Академика Лаврентьева, 3, Новосибирск, Россия²НГУ, ул. Пирогова, 2, Новосибирск, Россия

grebenkina@niic.nsc.ru

DOI: 10.26902/Graphene-23-033

Интеркалированные соединения фторированных графитов (ИФСГ) рассматриваются как перспективные материалы для электрохимии, сенсоров и др. На свойства ИФСГ оказывают влияние распределение атомов фтора по слоям графита, тип внедрённых молекул и их взаимное расположение в межслоевом пространстве. Изучение диэлектрических свойств ИФСГ при разных температурах и частотах приложенного электрического поля позволяет разделить вклады матрицы фторированного графита и внедрённых молекул и соотнести полученные результаты с структурой образцов.

В настоящей работе было проведено исследование диэлектрических свойств ИФСГ CF_x , где $x = 0.30\text{--}0.52$, с внедрёнными бромом, ацетонитрилом, дихлорметаном и тетрахлорметаном. Изучаемые образцы получены путём фторирования в парах смеси брома и трифторида брома при комнатной температуре. Измерения диэлектрической проницаемости проводилось с помощью метода параллельных пластин при температурах от $-180\text{ }^\circ\text{C}$ до $25\text{ }^\circ\text{C}$ в частотном диапазоне от 1 Гц до 1 МГц. Согласно полученным результатам диэлектрическая проницаемость матрицы фторированного графита не имеет температурной зависимости и увеличивается при уменьшении содержания фтора, что связано с возрастанием поляризуемости нефторированных сопряжённых участков. Зависимость диэлектрической проницаемости от температуры вызвана вкладом внедрённых молекул. В случае полярных молекул ацетонитрила и дихлорметана уменьшение диэлектрической проницаемости при понижении температуры связано с ориентационным механизмом поляризации, т. е. с вымораживанием движения внедрённых полярных молекул. Аналогичная особенность присутствует и для ИФСГ с неполярными молекулами тетрахлорметана, в связи с чем можно предположить либо перенос заряда на тетрахлорметан, либо появление дипольного момента за счёт деформации молекулы. Для ИФСГ с внедрёнными молекулами брома рост диэлектрической проницаемости начинается при $T > -10\text{ }^\circ\text{C}$. Данный эффект также связан с вымораживанием движения внедрённых молекул и в основном обусловлен ионизацией молекул брома, происходящей за счёт переноса заряда с нефторированных областей на слоях материала.

Авторы благодарят Министерство науки и высшего образования Российской Федерации, проект 121031700314-5.

Влияние структуры углеродных наночастиц на гипертермические свойства**О.А. Гурова, О.В. Седельникова, Е.В. Шляхова, А.В. Окотруб***Институт неорганической химии им. А.В. Николаева СО РАН, пр-т ак. Лаврентьева, 3,
Новосибирск, Россия
gurova@niic.nsc.ru***DOI: 10.26902/Graphene-23-034**

Наноструктуры на основе углерода обладают широким спектром перспективных преимуществ для биомедицинских применений. В них можно инкапсулировать как гидрофобные, так и гидрофильные вещества, что повышает стабильность лекарств и обеспечивает их адресную доставку. Ещё одним преимуществом углеродных наноматериалов является то, что они способны эффективно поглощать и преобразовывать инфракрасное излучение в тепло, необходимое для локального разогрева тканей и органов, поэтому, их можно применять в гипертермических целях.

В данной работе использовались несколько видов углеродных наноструктур: МУНТ, синтезированные методом газофазного осаждения, коммерческие ОУНТ (TUBALL™), приобретенные в компании OCSiAl, и углеродные нанохорны, синтезированные методом электродугового синтеза. Для открытия углеродных «шапочек» образцы УНТ прокаливались при 500 °С в муфельной печи на открытом воздухе. Удаление каталитического железа производилось с помощью комбинированного метода очистки с использованием соляной кислоты и магнитной сепарации. УНТ были заполнены серой с помощью ампульного метода. Часть ОУНТ после заполнения обрабатывали толуолом чтобы смыть поверхностную серу. Для придания гидрофильных свойств все наноструктуры были окислены.

Структура УНТ и нанохорнов была охарактеризована методами сканирующей и просвечивающей электронной микроскопии, спектроскопией комбинационного рассеивания света, рентгеновской фотоэлектронной спектроскопией. Были измерены оптические и термические свойства водных суспензий всех образцов.

Внедрение углеродных наноматериалов в биологические ткани было исследовано на личинках дрозофилы особей генотипа *hs-Gal4; UAS-GFP.nls*, образцы добавляли в питательную среду. Далее проводилось несколько контролей с нагреванием личинок ИК-лазером и наблюдение за реакцией «теплового шока» (ответная реакция клетки на стресс).

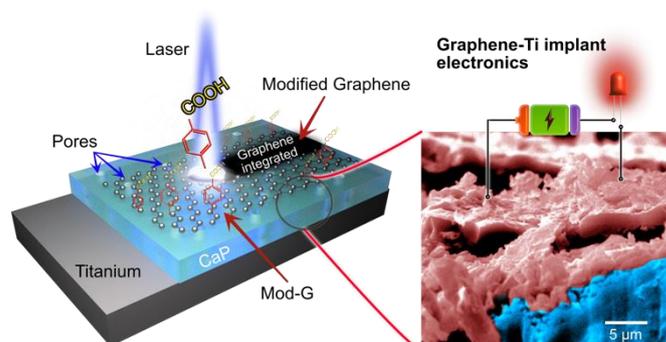
Авторы благодарят Министерство науки и высшего образования Российской Федерации, проект 121031700314-5.

Implant Electronics with Functionalized Graphene

E. Dogadina, R.D. Rodriguez, M. Fatkullin, A. Lipovka, A. Kozelskaya, S. Tverdohlebov,
E. Sheremet
Tomsk Polytechnic University, 634050, Lenin ave. 30, Tomsk, Russia.
raul@tpu.ru

DOI: 10.26902/Graphene-23-035

Graphene, the most studied nanomaterial, faces challenges in translation to medicine due to its stability, biocompatibility, and robustness over time. To address these issues, we propose a simple method to integrate graphene into calcium phosphate coatings on titanium alloy substrates. Modified graphene films [1] are laser-processed onto the surface, forming a nanocomposite to create graphene electronics on bone implants. This composite is biocompatible and mechanically robust, maintaining its electrical properties under physiological conditions and withstanding 100000 bending cycles. It can also generate heat without additional electric circuits.



The work was supported by project Priority 2030-NIP/IZ-007-375-2023

[1] Lipovka A., Petrov I., Fatkullin M. et al. // Carbon/. 2022. V. 194. P. 154-161.

Углеродные точки: синтез, свойства и перспективы применения**М.Н. Егорова, С.А. Смагулова***Северо-Восточный федеральный университет, 677000, Белинского 58, Якутск, Россия**mn.egorova@s-vfu.ru***DOI: 10.26902/Graphene-23-036**

В настоящее время разработка синтеза новых углеродных наноматериалов, обладающих люминесцентными свойствами, является перспективным направлением научных исследований [1]. Среди люминесцирующих углеродных наноматериалов (углеродные нанотрубки, оксид графена), углеродные точки (УТ) привлекают большой интерес, благодаря своим уникальным свойствам.

В данной работе гидротермальным и сольвотермальным методами были синтезированы УТ из таких прекурсоров как лимонная кислота (ЛК), глюкоза, сажа берёзовой коры, соки ягод (брусника, голубика, красная смородина, черемуха) и п-фенилендиамин. Методами СЭМ, ПЭМ и АСМ были определены формы и размеры углеродных точек. Из полученных данных показано, что углеродные точки из ЛК и глюкозы, представляют собой дискообразные наночастицы с размерами 7x2 нм и 11x4 нм, соответственно. Предполагается, что дискообразные углеродные точки состоят из нанопластин графена, расположенных перпендикулярно к плоскости диска на расстоянии 0.34 нм между ними. Результаты измерений на ИК и РФЭС показали наличие в углеродных точках различных функциональных групп (–ОН, С–О–С, С=О, С=N, N–H). При гидротермальном синтезе были получены УТ с люминесценцией в сине-зеленой области спектра, тогда как при сольвотермальном – в оранжево-красной области спектра. Обнаружено, что функционализация УТ атомами азота и фосфора увеличивает квантовый выход люминесценции УТ из ЛК до 61% и 46%, соответственно. Проведены эксперименты по модификации углеродных точек лазерным излучением с длиной волны 420 нм. Показана возможность применения УТ в различных приложениях. Были созданы конвертер света, маркировочные люминесцентные чернила, пленки УТ в матрице поливинилового спирта, применимые как слой люминофора в светодиодах и люминесцирующая ткань, как сенсор УФ излучения.

Работа выполнена при финансовой поддержке Гос. задания МНУВО РФ № FSRG–2023–0026.

[1] Barman M. K., Patra A. //J. Photochem. Photobiol. C: Photochem. Rev. 2018. V. 37. P. 1-22.

Формирование SiC на поверхности МУНТ, декорированной частицами кремнияА.В. Заворин^{1,2}, С.И. Мосеенков¹, В.Л. Кузнецов¹, А.Г. Селютин¹¹Институт катализа СО РАН, Пр-т Академика Лаврентьева 5, Новосибирск, Россия²Новосибирский государственный университет, Пирогова 2, Новосибирск, Россия

zavorin@catalysis.ru

DOI: 10.26902/Graphene-23-037

Многослойные углеродные нанотрубки (МУНТ) за счет своих уникальных физико-химических свойств являются одним из самых перспективных направлений развивающихся нанотехнологий. Введение МУНТ в состав керамической матрицы позволяет повысить трещиностойкость, прочность и при необходимости добиться появления электропроводности таких модифицированных материалов. Одним из важных аспектов при создании композитов с углеродными нанотрубками является природа интерфейсов между компонентами керамической матрицы и поверхностью МУНТ, при этом при внедрении МУНТ в керамическую матрицу с помощью высокотемпературных обработок возможно, как сохранение их морфологии, так и превращение их в высокопрочные карбиды. В качестве примеров можно привести работы по получению вакуумно-плотной токопроводящей керамики на основе оксида алюминия [1] и высокопрочной керамики на основе карбида бора [2]. Целью данной работы являлось исследование трансформации структуры композитов МУНТ-Si в процессе термической обработки в интервале температур 700–1350 °С. С использованием физико-химических методов исследования были получены новые данные о формировании частиц SiC при взаимодействии нанесенных частиц кремния с поверхностью МУНТ. Кроме того, была исследована кинетика и оценена энергия активации процесса образования SiC.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования РФ в рамках государственного задания Института катализа СО РАН (проект АААА-А21-121011390054-1).

[1] Shutilov R.A., Kuznetsov V.L., Moseenkov S.I. et al// Mater. Sci. Eng. B. 2020, V.254, P. 114508.

[2] Karagedov G.R., Shutilov R.A., Kolesov B.A. et al // J. Eur. Ceram. Soc. 2021. V. 41, № 12. P. 5782–5790.

Моделирование реакции восстановления кислорода на графенах, допированных азотомВ.А. Кисленко^{1,2}, С.В. Павлов², С.А. Кисленко²¹*Сколковский Институт Науки и Технологий (Сколтех), Большой бульвар д.30, стр.1, Москва, Россия*²*Объединённый институт высоких температур РАН, ул. Ижорская, д.13, стр.2, Москва, Россия**vitaly.kislenko@gmail.com***DOI: 10.26902/Graphene-23-038**

Данная работа посвящена исследованию реакции восстановления кислорода (РВК) на графенах, допированных азотом, в рамках метода Joint DFT. Актуальность данной задачи объясняется, прежде всего, поиском новых материалов для топливных элементов (ТЭ), которые позволили бы уйти от дорогостоящих электрокатализаторов на основе элементов платиновой группы с сохранением высоких показателей КПД. При этом выбор именно РВК объясняется тем, что катодная реакция восстановления кислорода является наиболее затрудненной, и ее катализ критически важен для создания эффективных ТЭ. При этом традиционные способы моделирования электрокаталитических реакций, такие как метод Норскова, названный позднее вычислительным водородным электродом (СНЕ – Computational Hydrogen Electrode), основаны на ряде предположений и упрощений, которые не обязательно выполняются в реальных системах, что может приводить к неверным выводам. В этой связи был проведен расчет термодинамики РВК с помощью Grand Canonical DFT, которая позволяет явно задавать и фиксировать электрохимический потенциал электрода.

В ходе работы, теоретически была предсказана потенциал-зависимая геометрия хемосорбированного кислорода, что влияет на распределение количества электронов между элементарными стадиями РВК, что, в свою очередь, способствует снижению ΔG для наиболее термодинамически затрудненной реакции хемосорбции O_2 .

Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ (грант №22-23-00535).

Оптимизация CVD - синтеза массивов УНТ на алюминиевой фольге**А.М. Кондранова^{1,2}, Д.В. Городецкий², А.В. Окотруб²**¹НГУ, ул. Пирогова 2, Новосибирск, Россия²ИНХ СО РАН, пр. Лаврентьева, 3, Новосибирск, Россия

a.kondranova@gmail.com

DOI: 10.26902/Graphene-23-039

В CVD-процессе для синтеза углеродных нанотрубок (УНТ) используются подложки из различных материалов: кремний, карбид кремния, графит, кварц, оксид алюминия, оксид магния и т.д. Традиционный рост на изолирующих подложках, таких как кремний и кварц, позволил получить знания о механизмах и о процессах зарождения и роста УНТ в диапазоне от массивов многослойных УНТ до однослойных УНТ. По сравнению с кремневыми подложками, синтез на алюминиевых подложках имеет ряд преимуществ, например, они более проводящие, обладают лучшей токопроводностью, более гибкие, открывают большие возможности для масштабирования производства и т.д. и являются перспективными для создания новых оптических элементов и элементов терагерцовой оптики.

В этой работе вертикально ориентированные массивы УНТ были синтезированы CVD-методом на алюминиевой фольге в качестве подложки. Синтез проводился в проточном трубчатом CVD-реакторе при температуре 800 °С при подаче в качестве прекурсора 2 масс.% раствора ферроцена в толуоле. В качестве газа-носителя использовался аргон и смесь аргона с водородом. В результате, были получены вертикально ориентированные массивы УНТ высотой около 100 мкм. Образцы исследовались методами спектроскопии комбинационного рассеяния света (КРС), рентгеновской фотоэлектронной спектроскопией (РФЭС). Морфология полученных УНТ была характеризована методами сканирующей электронной микроскопии (СЭМ). Было установлено, по данным КРС в полученных наноструктурах наблюдались характерные D, G пики и RBM-мода.

Кондранова А. М. благодарит за финансовую поддержку исследований со стороны программы "Приоритет-2030".

Электрохимические свойства наноструктурированного материала MoS₂/rGO в НИА

А.А. Коцун, А.В. Окотруб, Л.Г. Булушева

ИНХ СО РАН, просп. Акад. Лаврентьева, 3, Новосибирск, Россия

kotsun@niic.nsc.ru

DOI: 10.26902/Graphene-23-040

На сегодняшний день, щелочные металл ионные аккумуляторы являются эффективными накопителями энергии для портативных электронных устройств. Натрий-ионные аккумуляторы (НИА) являются перспективной заменой литий-ионных аккумуляторов (ЛИА) из-за низкой стоимости. Но ионный радиус Na⁺ (1.02 Å) больше и это влияет на изменение объема материала при циклировании. В связи с этим актуальной проблемой является подобрать анодный материал, способный стабильно работать и достигать высоких значений емкости.

Дисульфид молибдена является перспективным материалом положительного электрода благодаря его слоистой структуре, большому межслоевому расстоянию и высокой теоретической емкости. Однако, электроды из объемного MoS₂ страдают от плохой стабильности при циклировании, из-за которой предлагается использовать гибриды на его основе, например, с восстановленным оксидом графита (rGO).

В данной работе, синтез наноструктурированного гибрида на основе MoS₂ и rGO из аэрогеля тиомолибдата аммония и оксида графита методом быстрого нагрева в атмосфере Ar, что позволяет в условиях высокого локального давления выделяющихся газов создать связи между компонентами материала. Структура и состав композитов MoS₂/rGO были охарактеризованы методами спектроскопии КРС, РФА, РФЭС, CHNS и EELS с К-края. Из образцов были изготовлены электроды и собраны электрохимические полужайки, с металлическим натрием в качестве противоиэлектрода. Определена удельная емкость образцов, спектры электрохимического импеданса и проанализированы циклические вольтамперные кривые.

В процессе синтеза образуются обогащенные дефектами слои восстановленного оксида графена, соединенные с наночастицами MoS₂, расположенными перпендикулярно или вдоль поверхности rGO. Спектр с К-края потерь энергии электронов, подтвердил прочную связь между компонентами. Наилучшую стабильность работы при длительном циклировании показал образец 2MoS₂/rGO-600, который сохраняет удельную емкость 198 мАч/г при плотности тока 5 А/г в течении 1000 циклов. При изучении кинетики после долговременного циклирования было установлено, что во все электрохимические реакции основной вклад вносят окислительно-восстановительные процессы.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ (грант № № 23-73-00048).

**Взаимодействие сверхвысокочастотного излучения с материалами на основе
сверхдлинных углеродных нанотрубок**

Д.Ж. Куржумбаев^{1,2}, Э.Б. Митберг², М.П. Пархоменко³, Д.С. Каленов³, С.А. Урванов²,
Н.В. Казеннов², А.Р. Караева², В.З. Мордкович^{1,2}

¹Московский физико-технический институт (НИУ), Долгопрудный, Россия

²Технологический институт сверхтвердых и новых углеродных материалов, Троицк,
Москва, Россия

³Институт радиотехники и электроники им. В.А. Котельникова, Фрязинский филиал,
Фрязино, Россия

kurzhumbaev.dzh@phystech.edu

DOI: 10.26902/Graphene-23-041

Сверхдлинные углеродные нанотрубки (УНТ) обладают рядом структурных и физико-химических особенностей, которые приводят к более интенсивному взаимодействию с излучением сверхвысокочастотного (СВЧ) диапазона по сравнению с обычными УНТ. В первую очередь это касается высокого аспектного соотношения: длина таких УНТ может достигать порядка нескольких миллиметров при диаметре 4–20 нм [1]. В силу сопоставимости длины УНТ с длинами волн миллиметрового диапазона наблюдается высокий уровень поглощения в композиционных материалах, содержащих сверхдлинные УНТ в концентрации 1–2 масс.% [2]. Однако из-за отсутствия у УНТ выраженных магнитных свойств ($\mu \approx 1$) композиционные материалы, в состав которых входят УНТ, неизбежно отражают часть падающего излучения, поэтому их трудно использовать в качестве поглощающих покрытий и фильтров без дополнительного согласования. Проблема отражения излучения может быть решена как за счет введения в состав композита ферромагнитных частиц, так и за счет внедрения периодической структуры. В данной работе были исследованы диэлектрические и магнитные свойства композиционных материалов и периодических покрытий, сформированных на основе сверхдлинных УНТ. Установлено, что использование сверхдлинных УНТ позволяет достичь высокого уровня поглощения СВЧ излучения без добавления ферромагнитных веществ и, соответственно, без значительного утяжеления конечного материала.

[1] Mordkovich V.Z., Kazennov N.V., Ermolaev V.S. et al. // *Diam. Relat. Mater.* 2018. V. 83. P. 15-20.

[2] Kurzhumbaev D.Zh., Mitberg E.B., Kalenov D.S. et al.// *Nanobiotechnology Rep.* 2022. V. 17. P. 518-522.

Новые подходы к ковалентной функционализации малослойного черного фосфора органическими субстратами

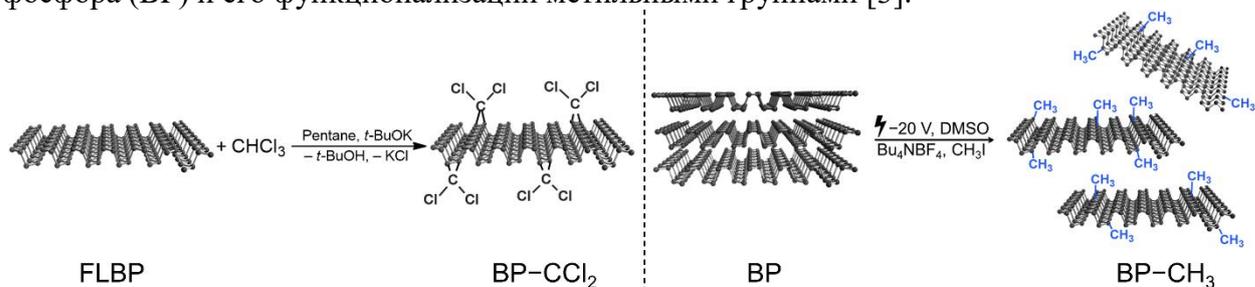
А.М. Кучкаев, А.М. Кучкаев, А.В. Сухов, Д.Г. Яхваров

ИОФХ им. А.Е. Арбузова - обособленное структурное подразделение ФИЦ КазНЦ РАН,
ул. Академика Арбузова 8, 420088, г. Казань, Россия
kuchkaev95@mail.ru

DOI: 10.26902/Graphene-23-042

Благодаря необычной складчатой и анизотропной структуре, уникальным полупроводниковым свойствам, высокой подвижности носителей заряда и хорошей биосовместимости двумерные материалы на основе малослойного черного фосфора (FLBP) находят применение в различных устройствах микро- и оптоэлектроники, фото- и электрокатализаторах, а также в биомедицинских материалах. Однако чувствительность данного материала к кислороду и влаге воздуха накладывает определенные ограничения к его использованию в условиях окружающей среды. Химическая функционализация и модификация структуры малослойного черного фосфора позволяют значительно улучшить стабильность материала к окислению, а также могут способствовать приобретению новых свойств материала [1].

В данной работе приведены новые подходы к функционализации малослойного черного фосфора карбеновыми интермедиатами [2], а также метод *in situ* расслоения черного фосфора (BP) и его функционализации метильными группами [3].



Полученные материалы (BP-CCl_2 и BP-CH_3) были охарактеризованы основными физико-химическими методами. Кроме этого, также показана возможность использования функционализированного малослойного черного фосфора в качестве неметаллического катализатора в процессе электрохимического выделения водорода.

Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ (грант № 23-13-00427).

[1] Kuchkaev A.M. et al. //Energy Technol. 2021. V. 9, №. 12. P. 2100581.

[2] Kuchkaev A.M. et al. //Nanomaterials. 2023. V. 13, №. 5. P. 826.

[3] Kuchkaev A.M. et al. //Int. J. Mol. Sci. 2023. V. 24, №. 4. P. 3095.

Влияние структуры каликсаренов на сенсорные свойства гибридных материалов на основе ОУНТ и КА\ТКА

С.А. Лаврухина, В.И. Сысоев, А.Д. Федоренко, Г.И. Семушкина, Л.Г. Булушева,
А.В. Окотруб

*Институт неорганической химии им. А.В.Николаева СО РАН,
Проспект академика Лаврентьева, 3, Новосибирск, Россия
x-rayspectroscopy@mail.ru*

DOI: 10.26902/Graphene-23-043

Поскольку молекулы NO₂ в газовой фазе оказывают значительное негативное воздействие на человека и окружающую среду, разработка компактных, высокочувствительных и высокоселективных сенсоров для его раннего определения в атмосфере является актуальной задачей. В настоящее время для этих целей широко используются сенсоры на основе металл-оксидов [1], но они работают при повышенных температурах и обладают невысокой селективностью.

Углеродные нанотрубки (УНТ) являются отличным материалом для обнаружения токсичных газов с высокой селективностью, таких как NO₂ [1], NH₃ [2, 3], H₂S, органический пар и т. д., позволяющие получить отклик при комнатной температуре, благодаря быстрому отклику, большой абсорбционной способности и устойчивости к окружающей среде. В тоже время чувствительность и селективность ОУНТ можно улучшить, используя молекулярные рецепторы – каликсарены и тиакаликсарены (КА\ТКА), способные инкапсулировать ионы или небольшие молекулы. При этом благодаря их способности к легкой функционализации можно подобрать определенный КА\ТКА под определенный аналит.

В этой связи в этой работе разработаны методики синтеза гибридных материалов на основе КА\ТКА и ОУНТ, изучены их сенсорные свойства, проведено квантово-химическое моделирование взаимодействия акцепторных (NO₂) и донорных (NH₃) газовых молекул с различными КА\ТКА, а также КА\ТКА с ОУНТ, исследовано влияние структуры КА\ТКА на сенсорные свойства гибридных материалов.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ (грант № 21-73-00229).

- [1] Zhang J., Liu X., Neri G. et al. // Adv. Mater. 2016. V.28. P. 795-831.
- [2] Evans G.P., Buckley D.J., Skipper N.T. et al. // RSC Adv. 2014. V. 4. P. 51395–51403.
- [3] Rigoni F., Tognolini S., Borghetti P. et al. // Analyst. 2013. V. 138. P. 7392–7399.

Гибридный материал на основе графена и нейлона в натальной электронике
А.А. Липовка¹, М.И. Фаткуллин¹, С.В.Щаденко¹, И.С. Петров¹, А.П. Чернова¹,
В.А. Мензелинцев¹, Шуанг Ли², Ли Цю², Чен Чонг², Р.Д. Родригес¹, Е.С. Шеремет¹.

¹Томский политехнический университет, пр. Ленина 30, г. Томск, Россия

²Сычуаньский университет, пр. Шунченг 252, г. Ченду, Китай

lipovka.a@gmail.com

DOI: 10.26902/Graphene-23-044

Носимая электроника для регистрации показателей здоровья и активности давно стала частью повседневности и реализуется как правило в форме “умных” браслетов. Однако для снятия более точных данных необходим более плотный контакт с кожей. В данном контексте, особо полезной является разработка сенсоров на основе текстиля. Такие датчики могут обеспечить не только более точную диагностику, но и комфорт носки. Нашим коллективом были изготовлены гибридные материалы на основе графена и нейлона при одновременном лазерно-индуцированном восстановлении оксида графена на поверхности ткани и вплавлении восстановленного графена в верхний слой полимерной ткани. Более того, дополнительно, сама синтетическая ткань служит прекурсором для образования лазерно-индуцированного графена. Благодаря объединению этих эффектов полученный после облучения материал обладает высокой электрической проводимостью ($87,6 \pm 36,2$ Ом/кв) и остается электропроводящим после стирки с моющими средствами или обработки ультразвуком. Использование лазера с длиной волны в видимом диапазоне позволило изготовить такие гибридные материалы не нарушив целостности ткани. Полученные электропроводящие ткани были использованы в качестве сенсоров деформации для идентификации жестов, регистрации пульса и распознавания отдельных слов в речи.

Дополнительно были показаны возможность использования текстилей в качестве нагревательных элементов и функционализация серебром для добавления антибактериальной активности. Полученные результаты создают прочную основу для дальнейшей разработки умной одежды.

Исследование выполнено при финансовой поддержке программы Приоритет 2030-НИП/ИЗ-007-375-2023.

Высокодисперсный никель на носителе азотсодержащего пористого углеродного материала для стабильного и селективного получения водорода из муравьиной кислоты

А.Д. Нищаклова¹, Д.А. Булушев², Ю.В. Шубин¹, С.В. Трубина¹, И.П. Асанов¹,
А.В. Окотруб¹, Л.Г. Булушева¹

¹Институт неорганической химии им. А.В. Николаева СО РАН, пр. Академика Лаврентьева, 3, Новосибирск, Россия

²Институт катализа им. Г.К. Борескова СО РАН, пр. Академика Лаврентьева, 5, Новосибирск, Россия
nishchakova@niic.nsc.ru

DOI: 10.26902/Graphene-23-045

Катализаторы на основе никеля широко применяются в лабораторных и в промышленных масштабах в реакциях гидрирования и дегидрирования. Высокое диспергирование металла на поверхности носителя способствует повышению эффективности протекания данных каталитических реакций [1]. В качестве носителей могут служить азотсодержащие пористые углеродные материалы (N-ПУМ).

В данной работе пористый углеродный материал был синтезирован при 800 °С методом химического осаждения из газовой фазы паров этанола на темплатные частицы СаО, полученные *in situ* при пониженном давлении в атмосфере Ar. Функционализация полученного материала производилась путём фторирования образца в парах смеси BrF₃/Br₂ с концентрацией фторирующего агента 10 масс.% с последующим дефторированием в токе газообразного аммиака в течение 30 мин при температуре 400 °С. Никелевые катализаторы были получены методом пропитки полученного N-ПУМ раствором ацетата никеля в тетрагидрофуране с последующей обработкой при 350 °С в токе Ar.

Материалы, полученные на каждой стадии синтеза, исследовали методом РФЭС. С помощью дефторирования удалось достичь концентрации азота 4.3 ат.%, половина из которого составила пиридиновая функциональная группа (398.3 эВ). Состояние никеля в катализаторах было исследовано с помощью РФА, РФЭС и EXAFS, показавших высокую дисперсию металла на поверхности носителя. Активность катализаторов были исследована в реакции разложения муравьиной кислоты, в которой они показали высокую селективность по отношению к водороду (93-96%) и стабильность протекания реакции. Кажущаяся энергия активации составила 98 кДж/моль.

[1] Nishchakova, A. D., Bulusheva, L. G., Bulushev, D. A. // Catalysts. 2023. V. 13, №. 5. P. 845.

Направленная функционализация поверхности одностенных углеродных нанотрубок кислородсодержащими группами

Н.И. Новосадов¹, М.В. Гудков¹, В.П. Мельников¹, М.К. Рабчинский²,
Д.А. Кириленко²

¹*Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Федеральный исследовательский центр химической физики им. Н.Н. Семенова Российской академии наук, Москва, Россия*

²*Физико-технический институт имени А.Ф.Иоффе, Санкт-Петербург, Россия
nicknovosadov@yandex.ru*

DOI: 10.26902/Graphene-23-046

В последнее время возрос интерес к разработке новых материалов для мультисенсорных систем и систем «Электронный нос». Эти системы высокоселективны и позволяют проводить анализ при низких концентрациях и температуре до 50 °С. Для этих целей использовался функционализированный графен. Однако необходимо провести исследования о возможности применения функционализированных одностенных углеродных нанотрубок (ОУНТ).

Процесс функционализации ОУНТ позволит получить материал с различными функциональными группами на его поверхности, а структура ОУНТ обеспечит высокую электрическую проводимость. Изменяя количественно функциональный состав ОУНТ, возможно достичь высокой селективности сенсорных слоев.

Однако, при работе с ОУНТ возникает проблема их агрегации и инертности. Решением этой проблемой является окисление. Процесс окисления приводит к образованию различных кислородсодержащих групп на поверхности ОУНТ, которые способствуют расталкиванию отдельных трубок и разрушению агломератов путем электростатического взаимодействия. Достаточное количество кислородсодержащих групп позволит упростить дальнейшую функционализацию при помощи жидкофазных реакций.

Исследование методом рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии показало, что при увеличении количества окислителя в реакционной среде увеличивается количество кислородсодержащих групп. При содержании KMnO_4 5 условных эквивалентов количество гидроксильных групп составляет 32 ат.%, в то время как максимальное значение в литературных данных составляет около 20 ат.%. С помощью сканирующей электронной микроскопии и просвечивающей электронной микроскопии выяснено, что исходные ОУНТ организованы в пучки диаметром 5–20 нм, причем толщина этого пучка уменьшается с увеличением степени окисления. При содержании KMnO_4 в 5 условных эквивалентах были обнаружены отдельные ОУНТ, не образующие пучки и агломераты.

Работа выполнена при финансовой поддержке Программы фундаментальных исследований РАН (рег.№ 122040400099-5).

Молекулярно-динамическое моделирование восстановления оксида графена под действием сверхбыстрого лазерного нагреваД.О. Потапов^{1,2}, Н.Д. Орехов^{1,2}, С.А. Евлашин²¹Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет), 117303, ул. Керченская, д.1 А, корп. 1, г. Москва, Россия²Сколковский институт науки и технологий, Большой бульвар д.30, стр.1, Москва 121205, Россия

potapov.do@phystech.edu

DOI: 10.26902/Graphene-23-047

Восстановление оксида графена – одна из наиболее перспективных методик получения графена в промышленных масштабах. В недавних экспериментах [1] было показано, что при наносекундном лазерном нагреве оксида графена до температур 3000–3300 К в присутствии атмосферного кислорода происходит активное восстановление вещества с образованием высоко упорядоченной графеновой структуры. Однако, известно, что при температурах выше 800–1000 К в присутствии кислорода происходит активный процесс горения углерода. В данной работе проводится молекулярно-динамическое моделирование оксида графена для того, чтобы объяснить необычный механизм восстановления материала при быстром высокотемпературном нагреве.

В данной работе в рамках метода молекулярной динамики с реакционным потенциалом Reax-FF [2] исследовалось поведение оксида графена в области температур 1000–3800 К. Особое внимание было уделено учету влияния атомов границы листа оксида графена на процесс горения. Было показано, что восстановление оксида графена и отжиг дефектов в глубине слоя происходит одновременно с процессом горения атомов углерода на краях пленки. В результате быстрого (на масштабе времени моделирования) процесса горения атомы кислорода из атмосферы оказываются связанными в молекулах CO₂/CO, в результате чего последующий процесс восстановления проходит в практически бескислородной среде. Результаты работы были опубликованы в [3].

Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ (грант № 22-73-10198).

[1] Evlashin S.A. et al. //Adv. Mater. Interfaces. 2018. V. 5, №. 18. P. 180073.

[2] Chenoweth K., Van Duin A.C.T., Goddard W.A. //J. Phys. Chem. A. 2008. V. 112, №. 5. P. 1040-1053.

[3] Orekhov N. D. et al. //Carbon. 2022. V. 191.P. 546-554.

Аминированный графен и нанокompозитные структуры на его основе: от синтеза к применениям

С.А. Рыжков¹, П.Д. Червякова¹, С.Д. Савельев¹, Г.А. Антонов¹, М.В. Байдакова¹,
 Д.Ю. Столярова², Д.А. Кириленко¹, С.И. Павлов¹, М. Бржежинская³, Р.Г. Чумаков²,
 Ю.А. Положенцева¹, М.К. Рабчинский¹

¹Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе Российской академии наук, Санкт-Петербург, Россия

²НИЦ "Курчатовский институт", пл. Академика Курчатова, д. 1, Москва, Россия

³Helmholtz-Zentrum Berlin für Materialien und Energie, Hahn-Meitner-Platz 1, Берлин, Германия

sergei.ryzhkov@mail.ioffe.ru

DOI: 10.26902/Graphene-23-048

Ковалентная функционализация графена аминogруппами позволяет управлять как электронной структурой материала, его работой выхода и электрофизическими свойствами [1], так и химической активностью. Аминogруппы могут выступать точками нуклеации наночастиц оксидов переходных металлов при их выращивании на поверхности графенового слоя, обеспечивающего контролируемый направленный рост наночастиц [2], и обеспечивать их последующую иммобилизацию. Это открывает возможности получения композиты с наночастицами металлов и оксидов металлов с размерами кристаллитов 3–15 нм равномерно распределенных по графеновому листу, однако вопросы как синтеза таких нанокompозитов, так и детального понимания их свойств еще требуют решения.

В данной работе рассматривается легко масштабируемый одноступенчатый синтез аминированного графена с содержанием аминogрупп до 14 ат.% и соотношением C/O равным 9.93 на основе восстановительного аминирования оксида. Представлены результаты исследований морфологии, электронной структуры и электрохимических свойств полученного материала. Продемонстрировано получение нанокompозита на основе аминированного графена с массивом индивидуально расположенных наночастиц смешанного оксида кобальта (II,III) размерами 10–15 нм и использование полученного материала в качестве анода для Li-ion батарей. Так, на основе композита «аминированный графен – 10 вес.% оксида кобальта» удалось получить прототип аккумулятора с удельной емкостью 1044 Ф/г (290.6 мА*ч/г). Более того, такой материал был апробирован в качестве катализатора для реакций выделения кислорода (OER). В рамках проведенных испытаний было показано, что применение полученного композита позволяет добиваться эффективности OER, сопоставимой с опубликованными результатами для чистого оксида кобальта при снижении его массы в несколько раз в нашем случае [3].

Работа выполнена в рамках выполнения Государственного задания № FFUG-2022-0010.

[1] Rabchinskii M.K., Ryzhkov S.A., Kirilenko D.A. et al. // Sci. Rep. 2022. V. 10, № 1, P.6902.

[2] Liu Y., Naseri A., Li T. et al. // ACS Appl. Mater. Interfaces. 2022. V. 14. P.16527-16537.

[3] McCrory C.C. L., Jung S., Ferrer I.M. et al. // J. Am. Chem. Soc. 2015. V 137, № 13. P. 4347-4357.

Влияние функционализации графена на его электронную структуру и электрофизические свойства

С.Д. Савельев¹, С.И. Павлов¹, М. Бржежинская², С.А. Рыжков¹, П.Д. Червякова¹,
Г.А. Антонов¹, М.В. Байдакова¹, Д.Ю. Столярова³, Д.А. Кириленко¹, М.К. Рабчинский¹
¹Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе Российской академии наук, Санкт-Петербург, Россия

²НИИЦ "Курчатовский институт", пл. Академика Курчатова, д. 1, Москва, Россия

³Helmholtz-Zentrum Berlin für Materialien und Energie, Hahn-Meitner-Platz 1, Берлин, Германия

Sviatoslav.Saveliev@mail.ioffe.ru

DOI: 10.26902/Graphene-23-049

Получение и исследование производных двумерных материалов, в частности графена, на сегодняшний день является одним из ключевых направлений исследований в области наноматериалов. Открытым вопросом продолжает оставаться влияние модификации графена различными функциональными группами на его электронную структуру и электрофизические свойства.

В данной работе были исследованы структура валентной зоны и механизмы проводимости различных производных графена, в частности карбоксилированной, карбонилированной, аминированной, тиолированной форм графена, синтезированных на основе ранее разработанных методов модификации и восстановления оксида графена [1–3].

Синхротронными методами было показано, что введение карбоксильных и кетонных групп в графен приводит к появлению локализованных электронных состояний в валентной зоне производных графена. Установлено, что данные состояния обусловлены энергетическими уровнями электронов молекулярных орбиталей кислородных групп, введенных в структуру материала. В то же время присутствие аминных и тиольных групп не приводит к появлению связанных с ними локализованных состояний в валентной зоне [1].

Было установлено влияние функционализации на механизм и величину проводимости графенового слоя. Были проведены измерения температурной зависимости сопротивления, результаты которых демонстрируют прыжковой механизм проводимости. Дальнейший анализ зависимости $\ln R$ от $T^{-1/3}$ (закон Мотта) или $T^{-1/2}$ (закон Эфроса-Шкловского), показал, что независимо от типа функционализации, материалы характеризуются прыжковым механизмом проводимости согласно закону Мотта. Полученные результаты позволяют продвинуться в разработке подходов к получению производных графена с заданными физическими свойствами

Работа выполнена в рамках выполнения Государственного задания № FFUG-2022-0010.

[1] Shnitov V.V., Rabchinskii M.K., Brzhezinskaya M. et al. //Small. 2021. V.17, №52, P. 2104316.

[2] Rabchinskii M.K.; Sysoev V.V., Ryzhkov S.A. et al. // Nanomaterials., 2021., V.12, №45.

[3] Rabchinskii M.K., Sysoev V.V., Glukhova O.E. et al. //Adv. Mater. Technol. 2022. V.7 P. 2101250.

Эффект межфазного фотогейтинга в транзисторах на основе углеродных нанотрубок на подложке Si/SiO₂ для высокочувствительного фотодетектирования

С.И. Серебренникова, Д.С. Копылова, Ю.Г. Гладуш, Д.В. Красников, С. Маилис,
А.Г. Насибулин

Сколковский Институт Науки и Технологий, ул. Нобеля д.3, Москва, Россия

Svetlana.Serebrennikova@skoltech.ru

DOI: 10.26902/Graphene-23-050

Однослойные углеродные нанотрубки (ОУНТ) являются перспективным материалом для фотодетекторов, в том числе фототранзисторов, благодаря своим уникальным оптоэлектрическим свойствам, например, высокой подвижности носителей и большому диапазону значений ширины запрещенной зоны. В данной работе мы представляем высокочувствительные фототранзисторы с каналами из ОУНТ на подложке из кремния/оксида кремния, которые основаны на эффекте фотогейтинга. Отклик канала из ОУНТ на затворное напряжение, вызванное эффектом фотогейтинга, существенно зависит от типа проводимости канала («металлический» или «полупроводниковый» в зависимости от формы передаточных характеристик), который определяется металличностью задействованных ОУНТ. В ходе работы мы определяем зависимость характеристик данных транзисторов от свойств подложки и типа ОУНТ, формирующих канал. Оптимизация структуры фототранзисторов с каналом, состоящим из разреженной сети ОУНТ, позволила нам улучшить удельную обнаружительную способность и относительный отклик по сравнению с ранее описанными фотодетекторами из графена [1] и углеродных нанотрубок [2]. В данной работе мы достигли значений абсолютной чувствительности ~ 60 А/Вт (при мощности падающего света ~ 2 нВт), удельной обнаружительной способности $7.8 \cdot 10^{11}$ см \cdot Гц^{1/2}/Вт и времени отклика 300 мкс, что свидетельствует о высоком потенциале детекторов из ОУНТ на основе эффекта фотогейтинга для очень слабых сигналов с высоким отношением сигнал/шум.

Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ (грант № 20-73-10256).

[1] Guo X., Wang W., Nan H. et al. // *Optica*, 2016. V. 3, № 10. P. 1066–1070.

[2] Marcus M.S., Simmons J.M., Castellini O.M. // *J. Appl. Phys.* 2006. V. 100. P. 084306.

Синтез углеродных точек с молекулярными флуорофорами и их применение в органических светодиодах (OLED)

А.Е. Томская^{1,3,4}, А.А. Ващенко², Е.Д. Образцова^{1,3}, С.А. Смагулова⁴

¹Институт общей физики им. А. М. Прохорова Российской академии наук, Москва

²Физический институт имени П. Н. Лебедева Российской академии наук, Москва

³Московский физико-технический институт, Долгопрудный

⁴Северо-Восточный федеральный университет, Якутск

tsash23@gmail.com

DOI: 10.26902/Graphene-23-051

Цель работы заключается в изготовлении OLED с использованием углеродных точек (УТ) в качестве эмиссионного материала.

Были синтезированы УТ из лимонной кислоты и этилендиамина с помощью гидротермального метода в автоклаве с последующей азотной пассивацией. Полученные УТ имеют фотолюминесценцию в синей области и квантовый выход выше 60%. Природа ФЛ объясняется наличием изолированных sp^2 -доменов (в основном молекул флуорофора, которые ковалентно связаны с УТ и производными пиридина) и дефектными состояниями.

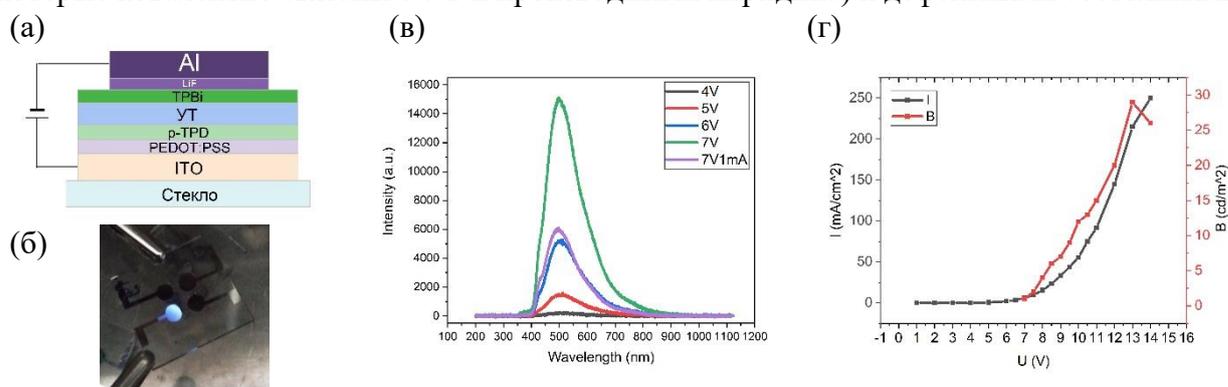


Рис. 1. Структура OLED ITO/PEDOT:PSS/p-TPD/УТ/TPBi/LiF/Al (а); фотография структуры при подключении (б); Спектр электролюминесценции OLED с УТ при напряжениях 4–7 В (в); Вольт-амперная характеристика (ВАХ) и зависимость яркости от напряжения OLED с УТ (г)

На рис.1а и 1б представлены схема структуры и фотография структуры OLED при подключении OLED, На рис. 1в представлен спектр электролюминесценции структуры OLED с использованием УТ при напряжениях 4–7 В. При напряжении 7 В полоса электролюминесценции имеет максимум при 498 нм. На рис. 1г представлена ВАХ, которая соответствует характеристике диода, и зависимость яркости от напряжения в структуре OLED.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ (грант № 21-72-20050) и Минобрнауки России (гос. задание FSRG-2023-0026).

Полимеризация бутилметакрилата в присутствии оксида графена как перспективный метод получения электропроводящих композитов

М.К. Торкунов, К.А. Шиянова, М.В. Гудков, А.А. Гулин, Н.Г. Рывкина, В.П. Мельников
*Федеральное государственное бюджетное учреждение науки федеральный исследовательский центр химической физики им. Н.Н. Семенова
Российской академии наук, 119991, ул. Косыгина, 4, Москва, Россия
tmk19981207@yandex.ru*

DOI: 10.26902/Graphene-23-052

Электропроводящие полимерные композиты обладают рядом полезных для различных практических применений свойств, такими как выдающаяся электро- и теплопроводность, устойчивость к коррозии, а также достойными физико-механическими характеристиками, что позволяет применять их в разнообразных областях науки и техники. Электропроводящие полимерные композиты обычно изготавливаются путем введения проводящего наполнителя. Количество вводимого наполнителя должно быть достаточным для образования проводящей сети. Стоит отметить, что наличие большого количества проводящих частиц может негативно сказаться на физико-механических свойствах конечного изделия. В связи с чем ставится задача эффективного распределения небольшого количества проводящего наполнителя.

Одним из методов, позволяющих эффективно распределить проводящий наполнитель в полимерной матрице, является введение наполнителя в систему мономера с последующей его полимеризацией. Метод известный как полимеризация *in situ*, который часто происходит по радикальному механизму полимеризации в эмульсионных или суспензионных системах.

Оксид графена является перспективным материалом, который может выступать в качестве наполнителя, так как в своей восстановленной форме обладает достаточной для различных применений электропроводностью, а в окисленной обладает амфифильностью и способен быть стабилизатором для эмульсии.

В рамках данной работы была изучена возможность получения электропроводящих полимерных композитов на основе полибутилметакрилата и восстановленного оксида графена методом *in situ* полимеризации бутилметакрилата в присутствии оксида графена с его последующим переводом в электропроводящую графеноподобную форму. Для полимеризационной системы рассмотрено влияние соотношения мономера к воде при фиксированном содержании оксида графена (1 масс.%), а также влияние метода сушки образца на морфологию и электропроводность композитов.

Влияние знака дзета-потенциала алмазных частиц на механизм самосборки композита «графен — детонационный наноалмаз»

М.К. Рабчинский¹, А.Д. Трофимук¹, А.В. Швидченко¹, М.В. Байдакова¹, Ю.В. Кульвеллис², М.В. Гудков³, Г.С. Петерс⁴

¹ФТИ им. А.Ф. Иоффе, Политехническая, 28, Санкт-Петербург, Россия

²НИЦ "Курчатовский институт" - ПИЯФ, Орлова Роца, 1, Гатчина, Россия

³ФИЦ ХФ РАН, ул. Косыгина, 4, Москва, Россия

⁴НИЦ "Курчатовский институт", пл. Академика Курчатова, д. 1, Москва, Россия
trofimuk.ad@mail.ioffe.ru

DOI: 10.26902/Graphene-23-053

Изучение механизмов взаимодействия наночастиц предваряет контролируемое создание функциональных многокомпонентных наноматериалов. На примере систем «оксид графена — наноалмаз» и «графен — наноалмаз» методами МУРР, доплеровского электрофореза, статического светорассеяния, UV-Vis спектроскопии, РСА, ПЭМ, РЭМ и газовой сорбции (БЭТ) показана возможность управления свойствами конечного продукта варьированием количества и типа исходных реагентов [1]. Показано, что дозированное добавление в суспензию оксида графена (ОГ) гидрозоля частиц детонационных наноалмазов (ДНА) позволяет втроекратно увеличить удельную поверхность образующегося аэрогеля по сравнению с аэрогелем ОГ, и этот эффект значительно сильнее при использовании ДНА с положительным дзета-потенциалом ($\zeta +$). Также показано, что полученные из ОГ и ДНА($\zeta +$) аэрогели обладают специфической морфологией: пластины ОГ скручены. Этот эффект объяснён в терминах электрофоретических подвижностей наночастиц: использование ДНА($\zeta +$) позволяет получать композиты в виде аэрогелей с большей долей разделённых листов ОГ, что в условиях взаимной компенсации заряда приводит к скручиванию листов ОГ в конечной структуре и к существенному увеличению её удельной поверхности.

Разные этапы работы выполнены в рамках Государственного задания № FFUG-2022-0012, Программ фундаментальных исследований Российской академии наук (проект №1021051101696-3-1/4/3 и проект №122040400099-5) и проекта, поддержанного Министерством науки и высшего образования Российской Федерации (Соглашение No 075-15-2021-1349). Структурные исследования выполнены с использованием оборудования ФЦКП "Материаловедение и диагностика в передовых технологиях" ФТИ им. А.Ф. Иоффе.

[1] Рабчинский М.К., Трофимук А.Д., Швидченко А.В. и др. // ЖТФ. 2022. Т. 92, №12. С.1853-1868.

Лазерная обработка MoS₂ для повышения фотокаталитической активности

Т.Х. Чан, Р.Д. Родригес, Н.Е. Вилла, С.В. Щаденко, А.А. Аверкиев
Томский политехнический университет, Ленина 30, Томск, Россия
Cungbinh9327@gmail.com

DOI: 10.26902/Graphene-23-054

С момента открытия графена, двумерные материалы стали привлекательными не только для фундаментальных исследований, но и практических применений. Дисульфид молибдена (MoS₂) занимает второе место среди наиболее изученных двумерных материалов после графена и вызывает огромный интерес в связи с его потенциальным использованием в катализе, оптоэлектронике и энергетике [1]. Различные подходы: электронная, химическая, лазерная обработка и т.д. были использованы для модификации структуры и свойств MoS₂ в конкретных применениях. Лазерная обработка по-прежнему является предпочтительным методом благодаря своим универсальным свойствам: масштабируемости, пространственному структурированию, дешевизне и т. д., что подтверждается большим количеством работ, опубликованных в последнее десятилетие. При обработке MoS₂ с помощью лазера, обнаружили новый эффект лазерного фототермического нагрева, который приводит к химической активации MoS₂. Фототермический эффект был подтвержден экспериментами в зависимости от температуры, измерениями локальной температуры с помощью нанолокализованных зондов и компьютерным моделированием. Дальнейшая функционализация модифицированного MoS₂ лазером с AgNO₃ продемонстрировала значительное увеличение фотокаталитической активности, до 100% выхода по сравнению с незначительной активностью исходного материала. Наши результаты не только способствуют пониманию индуцированной светом модификации свойств MoS₂, но также обеспечивают новый подход к пространственному контролю химической активации MoS₂ для разработки высокоэффективных полупроводников на основе двумерных материалов в качестве нанотехнологических каталитических материалов.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта Приоритет 2030-НИР/ИЗ-007-0000-2023.

[1] Ganatra R, Zhang Q. // ACS Nano. 2014. V. 8. P. 4074–4099.

Самоорганизация наночастиц графена на границе наножидкость - углеводородФ.К. Шабиева^{1,2}, Ю.В. Пахаруков^{1,2}, Р.Ф. Сафаргалиев^{1,2}, А.В. Шабиева³¹ФГАОУ ВО ТюмГУ, ул. Володарского, д.6, г. Тюмень, Россия²ФГБОУ ВО ТИУ, ул. Володарского, д.38, г. Тюмень, Россия³ФГБОУ ВО ТМУ, ул. Одесская, д.54, г. Тюмень, Россия

faridshab@mail.ru

DOI: 10.26902/Graphene-23-055

Концепция возникновения порядка из хаоса или самоорганизации большого числа элементов в открытой системе были развиты еще в середине прошлого века И.Р. Пригожиным [1] и Ю.Л. Климонтовичем [2]. Явление самоорганизация как объект изучения синергизма, не только не потеряло своей актуальности, но и привлекает всё больше исследователей из разных областей науки (физика, химия, биология и т. д.). Явление самоорганизации структур и наноструктур, в частности, основывается на существовании множества различных типов взаимодействий таких как: Ван-дер-ваальсовы, магнитные, электростатические, молекулярные дипольные, водородные связи, ковалентное перекрывание. Так как графеновые наночастицы обладают гигантским Ван-дер-ваальсовым взаимодействием, увеличивающим длину корреляции, явление самоорганизации в таких системах имеют ярко выраженный характер. Образование связей между графеновыми наночастицами усиливается при подключении магнитных, электростатических взаимодействий и образование водородных связей. Чаще всего подобные явления проявляются в наножидкостях, а усиление происходит на различных межфазных границах. В нашем исследовании рассматривается явление самоорганизации наночастиц графена на границе раздела углеводородных жидкостей и водной графеновой наножидкости. Показано образование упорядоченной кристаллической плёнки из гексановых и октановых молекул и графеновых наночастиц. Установлено, что подобные наноструктурированные плёнки обладают гистерезисом вольтамперных характеристик, тушением фотолюминесценции графеновой наножидкости и изменением коэффициента межфазного натяжения двух несмешивающихся жидкостей.

[1] Пригожин И. Введение в термодинамику необратимых процессов // Ижевск: НИЦ «Регулярная и хаотическая динамика». – 2001. - 160 с.

[2] Климонтович Ю. Л. Введение в физику открытых систем. // М.: Янус-М. - 2002. - 290 с.

Синтез массивов МУНТ для целевых применений**А.В. Шиверский, С.Г. Абаимов***Сколковский Институт Науки и Технологий, ул. Большой бульвар 30/1, Москва, Россия
aleksei.shiverskii@skoltech.ru***DOI: 10.26902/Graphene-23-056**

Наноразмерные материалы стали неотъемлемой частью решения многих научных и прикладных задач. Их использование в композиционных полимерных материалах придает последним дополнительные функциональные возможности [1]. С целью развития технологии вне автоклавного формования полимерных матричных композитов на основе препрегов были проведены исследования вертикально ориентированных массивов многостенных углеродных нанотрубок (МУНТ), синтезированных на оригинальном оборудовании.

Массивы МУНТ охарактеризованы спектроскопией комбинационного рассеяния. Получены временные зависимости роста массивов МУНТ высотой 5–800 мкм. Проведено исследование морфологии массивов МУНТ средствами СЭМ и ПЭМ. Показано влияние высокотемпературного отжига и окисления на свойства массивов МУНТ. Полученные массивы использованы в качестве нагревательных и армирующих элементов, улучшающих межслоевое взаимодействие монослоёв препрега, в углеродных ламелях, изготовленных путем вне автоклавного формования.

Работа выполнена в рамках программы Skoltech NGP “Multifunctional Fusion: Life-cycle enhancements via data-driven nanoengineering of advanced composite structures”.

[1] Shiverskii A.V., Owais M., Mahato B. et al. // *Polymers*. 2023. V. 15, № 6. P. 1573.

**Электропроводящие полимерные композиты сегрегированной структуры,
наполненные углеродными наноматериалами**

**К.А. Шиянова, М.В. Гудков, М.К. Торкунов, Н.Г. Рывкина, А.А. Гулин, С.Л. Баженов,
В.П. Мельников**

*Федеральное государственное бюджетное учреждение науки федеральный
исследовательский центр химической физики им. Н.Н. Семенова
Российской академии наук, ул. Косыгина, д.4, Москва, Россия
shyanovakseniya@mail.ru*

DOI: 10.26902/Graphene-23-057

Разработка электропроводящих полимерных композитов с формированием сегрегированной структуры в настоящее время является одним из наиболее перспективных направлений исследований в области получения композитов с высокой электропроводностью. В данный момент требуется минимизировать количество вводимого наполнителя, сохранив высокие значения электропроводности и физико-механические свойства композитов на уровне, отвечающем требованию их практического использования. Электропроводящие полимерные композиты могут использоваться для производства безметаллических микроэлектронных устройств, таких как суперконденсаторы, литий-ионные и литий-полимерные батареи, газовые и биологические сенсоры, а также для экранов, отражающих электромагнитные помехи, для снятия электростатического электричества и в качестве конструкционных частей низкотемпературных топливных элементов.

В рамках данного исследования были разработаны и исследованы электропроводящие полимерные композиты на основе поливинилхлорида, сверхвысокомолекулярного полиэтилена и фторопласта-42. В качестве углеродного нанонаполнителя использовался восстановленный оксид графена, многостенные и одностенные углеродные нанотрубки. Посредством испытаний на сжатие, сканирующей электронной микроскопии, диэлектрической спектроскопии и резонаторного метода в прямоугольном резонаторе были исследованы электрофизические и физико-механические характеристики полученных композитов. Максимальное значение электропроводности (12 См/м) было достигнуто при наполнении 1 масс.% ОУНТ фторопласта-42. Также установлено, что полученные материалы в перспективе могут использоваться в качестве экранов, защищающих от электромагнитных помех в СВЧ-диапазоне.

Ковалентные триазиновые каркасы в качестве носителей для Pd катализаторовД.А. Булушев¹, Ф.С. Голубь¹, С.В. Трубина², В.В. Зверева²¹Институт катализа им. Г.К. Борескова, Лаврентьева 5, Новосибирск²Институт неорганической химии им. А.В. Николаева, Лаврентьева 3, Новосибирск
dmitri.bulushev@catalysis.ru**DOI: 10.26902/Graphene-23-058**

Основными компонентами ковалентных триазиновых каркасов (СТФ) являются углерод и азот. Структура этих материалов в идеальном случае является слоистой с расстояниями между слоями, близкими к расстояниям в графите. Удельные площади поверхности STF и их термическая устойчивость очень высоки. Кроме того, поверхностные азотные центры могут стабилизировать нанесенные на них металлы в форме наночастиц, молекулярных комплексов и отдельных атомов. Это может являться основанием для их использования в качестве носителей для катализаторов.

В работе было приготовлено пять STF материалов из различных органических прекурсоров, содержащих нитрильные группы. Методом пропитки был нанесен Pd (1 вес.%), и полученные материалы были исследованы в реакции получения водорода из газообразной муравьиной кислоты. Показано, что активность и селективность катализаторов определяются молекулярной структурой активных Pd центров. Катализаторы с моноатомными центрами Pd²⁺-N₄ проявили низкую активность и высокую кажущуюся энергию активации, в то время как катализаторы с моноатомными центрами Pd²⁺-C₂N₂ и Pd²⁺-CN₃ проявили значительно более высокую активность, которая превышала активность металлических частиц (1–5 нм), нанесенных на пористый углерод и графитоподобный нитрид углерода. Таким образом представляется перспективным использовать STF материалы в качестве носителей для катализаторов.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 22-23-00608.

Влияние размерного эффекта на составы и свойства окиси малослойных графенов

В.Г. Макотченко, И.П. Асанов

*ФГБУН Институт неорганической химии им. А.В. Николаева, г. Новосибирск, Россия,
mwg@niic.nsc.ru***DOI: 10.26902/Graphene-23-059**

Изучено влияние размерного эффекта на составы и свойства окиси малослойных графенов (ОМСГ), полученных по методу Штауденмайера. В работе использовали малослойные графены (МСГ) со средней степенью расщепления 3–4 нм, образующиеся при деструктивном термическом разложении интеркалированных соединений полифториддиуглерода общего состава $C_2F \cdot xR$, где R – трифторид хлора, трифторидом брома, ацетон и тетрахлорид углерода.

В ходе работы установлено:

1. При окислении МСГ по методу Штауденмайера образуется окись МСГ.
2. Окисление МСГ проходит в 2 этапа. На первом этапе присоединяются эпоксидные группы. Дальнейшее окисление МСГ происходит за счет присоединения гидроксильных групп.
3. Окисление МСГ сопровождается «выгоранием» углеродных атомов графеновой плоскости как в направлении «а – b», так и в направлении «с» вплоть до полного сгорания МСГ.
4. Интеркалирующая способность ОМСГ при степени расщепления вдоль оси «с» ≤ 4 нм определяется числом окисленных графеновых слоев и характером взаимодействия в системе «гость – хозяин».
5. ОМСГ с водой образует соединение второй ступени с межслоевым расстоянием 7.4 Å. Межслоевое расстояние безводной ОМСГ составляет 6.0 Å.
6. В отличие от окиси графита, разлагающийся в один этап, ОМСГ разлагается в 3 этапа. На первом этапе происходит деинтеркалирование воды, затем разлагаются эпоксидные и гидроксильные группы.
7. Температура деинтеркалирования воды из окиси МСГ и разложение функциональных групп уменьшается с уменьшением числа окисленных графеновых слоев.

Работа поддержана Министерством науки и высшего образования Российской Федерации, проект № 121031700321-3, № 121031700314-5.

Синтез допированного бором графеноподобного углеродного наноматериала
В.В. Чесноков, И.П. Просвирин, Е.Ю. Герасимов, Е.А. Паукштис, А.С. Милюшина,
В.Н. Пармон

*Институт катализа им. Г.К. Борескова СО РАН, проспект Академика Лаврентьева, 5,
Новосибирск 630090, Россия
chesn@catalysis.ru*

DOI: 10.26902/Graphene-23-060

Разработан новый метод синтеза допированного бором графеноподобного углеродного наноматериала. В начале был синтезирован графен темплатным методом [1]. В качестве матрицы использовался оксид магния. Отложение углерода на поверхности оксида магния проводили из 1,3-бутадиена, разбавленного аргоном, в проточном кварцевом реакторе при температуре 600 °С. После зауглероживания частицы MgO были покрыты тонкой углеродной пленкой. Затем углеродную пленку очищали от матрицы MgO путем обработки композита С-MgO в растворе соляной кислоты. Удельная поверхность синтезированного графена равнялась 1300 м²/г. Далее в автоклаве на поверхности полученного графена из фенолборной кислоты, растворенной в (80% ацетон-этанол) смеси, при температуре 650 °С отлагался дополнительный слой углерода, допированный бором. Свойства В-графеноподобного углеродного наноматериала изучали методами рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии (XPS), просвечивающей электронной микроскопии высокого разрешения (HRTEM), рамановской спектроскопии и адсорбционно-десорбционных методов. Осаждение дополнительного слоя углерода, допированного бором, привело к увеличению толщины слоя графена с 2 – 4 до 3 – 8 монослоев и уменьшению удельной поверхности с 1300 до 800 м²/г. Концентрация бора в В-графеноподобном углеродном наноматериале, определенная различными физическими методами, составляла 4 масс. %.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ (грант № 17–73–30032).

[1] Chesnokov V.V., Chichkan A.S., Bedilo A.F. и др. //Doklady Physical Chemistry. 2019. V.488, №2. P. 154-157.

Электрические свойства пленок оксида ванадия V₂O₅, выращенных методом ALD на поверхности Si и FG/Si

Н.А. Небогатикова¹, И.В. Антонова^{1,2}, А.И. Иванов¹, В.А. Володин^{1,3}, Б.В. Волошин¹,
В.А. Селезнев¹

¹*Институт физики полупроводников СО РАН, Новосибирск*

²*Новосибирский государственный технический университет, Новосибирск*

³*Новосибирский государственный университет*

nadonebo@gmail.com

DOI: 10.26902/Graphene-23-061

Одним из перспективных способов создания атомарно тонких пленок большой площади является метод атомно-слоевого осаждения (atomic layer deposition, ALD). В данной работе были созданы и исследованы гетероструктуры на основе поликристаллических пленок V₂O₅ с толщиной 1–40 нм, выращенных методом ALD. V₂O₅ представляет интерес с точки зрения получения слоев, демонстрирующих эффект переключения сопротивления. Пленки V₂O₅ были выращены на поверхности подложек Si либо поверх слоев частично фторированного графена на поверхности кремниевых подложек FG/Si. Слои фторографена FG/Si были созданы при помощи струйной 2D-печати, их толщина составляла ~ 4 нм. Для характеристики пленок были использованы эллипсометрия (для контроля толщины пленок на этапе роста), спектроскопия комбинационного рассеяния света, атомно-силовая микроскопия, анализ температурной зависимости проводимости и анализ частотной зависимости комплексной проводимости.

При анализе электрических свойств исследуемых пленок и гетероструктур большое внимание было уделено эффекту резистивного переключения сопротивления. Наибольшее отношение токов ON/OFF наблюдалось для пленок V₂O₅ с толщиной 1 и 2 нм, выращенных на Si. Величина переключений сопротивления составляла 1–3 порядка, напряжение переключения составляло ~ 0.7–1.5 В. Было показано, что отжиг пленок при T ~ 350°C приводит к исчезновению переключений. Для пленок толщиной более 5 нм эффект резистивных переключений также практически не наблюдался.

Сравнение полученных данных показало, что для дальнейшего создания и исследования мемристоров наиболее перспективны тонкие пленки толщиной до 2 нм, выращенные методом ALD и содержащие наночастицы V₂O₅. С точки зрения селективного роста однородных пленок большой площади наиболее перспективны гетероструктуры V₂O₅/FG/Si.

Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ (грант № 22-19-00191).

Сравнительное исследование аморфного углерода в наноструктурированных углеродных материалах методами ПЭМ, РФЭС, СКР и РФА

С.И. Мосеенков¹, В.Л. Кузнецов¹, Н.А. Золотарев¹, Б.А. Колесов^{1,2}, И.П. Просвирин¹,
А.В. Ищенко¹, А.В. Заворин¹

¹*Институт катализа им. Г.К. Борескова СО РАН, пр. Ак. Лаврентьева, д. 5,
Новосибирск, Россия*

²*Институт неорганической химии им. А.В. Николаева СО РАН, пр. Ак. Лаврентьева, д. 3,
Новосибирск, Россия
moseenkov@catalysis.ru*

DOI: 10.26902/Graphene-23-062

В работе проведено охарактеризование аморфизованных форм углерода (АУ) в широком наборе наноструктурированных углеродных материалов (УМ: сажа, многослойные углеродные нанотрубки, каталитический волокнистый углерод, углерод луковичной структуры, взрывные наноалмазы). АУ состоит из атомов углерода в трёх основных электронных состояниях, соответствующих sp , sp^2 и sp^3 гибридизации электронных оболочек. Использование высокотемпературных обработок, приводящих к укрупнению первичных графеновых блоков, позволило проследить за процессом их графитизации. При нагреве всех УМ при использовании ПЭМ наблюдалось увеличение протяженности графеновых фрагментов, числа слоев в образующихся графитоподобных блоков, при этом в спектрах КР наблюдалось уменьшение D_1 мод и увеличение G и $2D$ колебательных мод, что свидетельствует о графитизации УМ. По причине неоднородности аморфного углерода при обработке КР спектров в районе моды D_3 (колебания аморфного углерода) было выделено два пика ($\sim 1454 \text{ см}^{-1}$ и 1523 см^{-1}), что, по-видимому, соответствует различным формам АУ. Из результатов обработки КР спектров (анализ D мод колебаний, их соотношение) было показано, что природа и количество углерода в аморфном состоянии существенно различается для разных типов УМ.

Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ (грант № 22-23-00932).

Особенности синтеза графена с помощью реакции Будуара

Д.В. Красников¹, А. К. Гребенко^{1,2}, Н. С. Хотеева¹, З. В. Бедрань², Л. Н. Алябьева²,
Р. Н. Можчиль^{3,4}, А. М. Ионов³, Б. П. Горшунов², А. Г. Насибулин¹

¹Сколковский институт науки и технологий, г. Москва, Россия

²Московский физико-технический институт, г. Долгопрудный, Россия

³Институт физики твёрдого тела, г. Черноголовка, Россия

⁴Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ», г. Москва, Россия

d.krasnikov@skoltech.ru

DOI: 10.26902/Graphene-23-063

Уникальный набор свойств (подвижность носителей заряда, проводимость, механическая прочность) нивелируются дефектами и межзеренными границами, что обуславливает необходимость развития методов получения бездефектных объектов. Тем не менее, механическая эксфолиация NOPG, позволяющая к настоящему моменту получать графен наилучшего качества, обладает ограниченной масштабируемостью. Поэтому наиболее перспективным подходом к масштабируемому синтезу монокристаллов однослойного графена признается химическое осаждение из газовой фазы на поверхности катализатора. В настоящей работе [1] с помощью комбинации физико-химических методов (растровая электронная микроскопия, атомно-силовая микроскопия, терагерцовая и оптическая спектроскопии, спектроскопия комбинационного рассеяния, рентгеновская фотоэлектронная спектроскопия, метод дифракции отраженных электронов, дифракция медленных электронов и др.) были изучены особенности нуклеации (зародышеобразования) и роста кристаллов графена на медном катализаторе, а также выявлено состояние поверхности катализатора. Полученные кинетические данные в комбинации с моделированием на основе метода функционала плотности (DFT) позволили предложить скорость-лимитирующие процессы и предложить новые модели нуклеации и роста графена. Более того, тонкая настройка условий получения графена (температура, состав реакционной среды, давление в реакторе) открыло путь к оригинальной отечественной технологии получения не только исключительно однослойного графена с сантиметровым размером кристаллитов, но материала с контролируемой дефектностью.

Исследование выполнено при частичной поддержке гранта Российского научного фонда № 21-19-00226 и Советом по грантам Президента РФ № НШ-1330.2022.1.3.

[1] Grebenko A.K. et al. //Adv. Scie. 2022. V. 9, № 12. P. 2200217.

Синтез малослойного графена в условиях самораспространяющегося высокотемпературного синтеза из циклических биополимеров и его применения

А.А. Возняковский¹, А.П. Возняковский², С.В. Кидалов¹, Н.Д. Подложнюк¹

¹ФТИ им. А.Ф. Иоффе, Политехническая 26, Санкт-Петербург, Россия

²ФГУП «НИИСК», Гапсальская 1, Санкт-Петербург, Россия

alexey_inform@mail.ru

DOI: 10.26902/Graphene-23-064

Представлена методика синтеза частиц малослойного графена (количество слоев в пачке меньше 10) в виде порошка из циклических биополимеров в условиях самораспространяющегося высокотемпературного синтеза [1]. Разработанная методика позволяет получать большие объемы материала (развернуто лабораторное производство с производительностью до 10 кг/мес.) используя в качестве сырья отходы деревообрабатывающей промышленности (кору деревьев, лигнин, стебли борщевика Сосновского). Было установлено, что синтезируемый малослойный графен является эффективной добавкой при создании композитов на основе металлов и полимеров; добавкой при создании СОЖ и термопаст; выступать в качестве эффективного сорбента радионуклидов и промышленных красителей; матрицы для создания биопрепаратов для ликвидации нефтяных загрязнений; в качестве добавки при создании пиротехнических составов, а также выступать в качестве материала катода для получения низкороговой полевой эмиссии.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ и БРФФИ № 20-53-04026.

[1] Voznyakovskii A.P., Vozniakovskii A.A., Kidalov S.V. //Nanomaterials. 2022. V. 12. № 4. P. 657.

Синтез и применение графитоподобного нитрида углерода для процессов альтернативной энергетикиД.Б. Васильченко^{1,2}, А.В. Журенок², А.Ю. Куренкова², Е.А. Козлова²¹*Институт неорганической химии им. А.В. Николаева СО РАН, пр. Ак. Лаврентьева 3, Новосибирск, Россия*²*ФИЦ Институт катализа им. Г.К. Борескова СО РАН, пр. Ак. Лаврентьева 5, Новосибирск, Россия
kozlova@catalysis.ru***DOI: 10.26902/Graphene-23-065**

Тенденция к сокращению легкодоступных запасов высококачественного ископаемого углеродсодержащего сырья определяет острую необходимость освоения доступных альтернативных и, прежде всего, возобновляемых источников энергии. При этом одним из наиболее перспективных направлений развития энергетики будущего может стать развитие солнечной энергетики. Особо привлекательным в этой области считается процесс фотокаталитического получения водорода под действием видимого света, поскольку в данном случае осуществляется трансформация солнечной энергии в энергию химических связей [1]. Другим перспективным фотокаталитическим процессом является восстановление углекислого газа, по сути, имитирующее природный фотосинтез [2].

Основным фактором, сдерживающим практическое использование фотокаталитических процессов, является отсутствие эффективных и одновременно стабильных гетерогенных фотокатализаторов, функционирующих под действием видимого света, составляющего около 43% солнечного спектра. В последнее время больше внимание исследователей привлекает слоистый полимерный материал – графитоподобный нитрид углерода g-C₃N₄. Данный материал обладает свойствами полупроводника с шириной запрещенной зоны 2.7 эВ, и положениями валентной зоны и зоны проводимости, подходящими для фотокаталитического разложения воды. Разрабатывают различные подходы к увеличению активности фотокатализаторов на основе g-C₃N₄. В настоящем докладе проведен сравнительный анализ основных синтетических подходов для модификации графитоподобного нитрида углерода и сделаны выводы о наиболее эффективных методах повышения фотокаталитической активности g-C₃N₄ в реакции получения водорода и восстановления углекислого газа под действием видимого света.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант № 21-13-00314).

[1] Козлова Е.А., Пармон В.Н. // Успехи химии. 2017. Т. 86, № 9. С. 870-906.

[2] Козлова Е.А., Люлюкин М.Н. и др. // Успехи химии. 2021. Т. 90, № 12. С. 1529-1543.

Синтез графена на наночастицах Al_2O_3 , Ni и Fe методом химического газофазного осажденияЮ.А. Саламатов, Е.А. Кравцов, Ю.В. Корх, Ю.С. Поносов, А.Е. Ермаков, М.А. Уймин, Т.В. Кузнецова*Институт физики металлов УрО РАН, ул. С. Ковалевской 18, Екатеринбург, Россия
kravtsov@imp.uran.ru***DOI: 10.26902/Graphene-23-066**

Нанопорошки, состоящие из покрытых графеном (Gr) металлических и диэлектрических наночастиц, могут представить большой интерес ввиду их уникальных свойств и возможности их широкого прикладного использования в различных областях от катализа до производства биомедицинских материалов. Следует отметить, что, в то время как синтез графена на металлических (Cu, Ni, Fe) и диэлектрических (Al_2O_3) подложках методами CVD и PVD хорошо освоен и не представляет затруднений, получение покрытых графеном наночастиц остается во многом нерешенной задачей. В настоящем докладе мы сообщаем об успешном синтезе нанопорошков Fe@Gr, Ni@Gr и Al_2O_3 @Gr. В качестве исходных объектов использовались наночастицы Fe_3O_4 , NiO и Al_2O_3 диаметром от 20 до 50 нм в виде порошков либо в таблетированном виде. Синтез графена проводился на установке CVD с использованием метана в качестве носителя углерода. Контроль количества осажденных монослоев графена и степени его дефектности проводился с помощью комбинационного рассеяния света. При использовании наночастиц Fe_3O_4 и NiO происходит полное восстановление Fe и Ni с образованием нанопорошков Fe@Gr и Ni@Gr, где толщина графена составляет 1-2 монослоя, содержащего низкую концентрацию дефектов. Наблюдается частичное спекание наночастиц, которого можно избежать если использовать смесь указанных наночастиц с наночастицами Al_2O_3 . При использовании больших потоков газов и увеличенного времени экспозиции удается получить покрытые графеном толщиной в 1-2 монослоя наночастицы Al_2O_3 , однако, в этом случае наблюдается значительная дефектность графена.

Модифицирование оксида графена с целью контроля транспортных и фоточувствительных свойств

А.Н. Баранов^{1,3}, Н.Д. Митюшев^{2,3}, Г.Н. Панин³

¹*Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, химический факультет, Ленинские горы, стр. 3, Москва, Россия*

²*Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, факультет наук о материалах, Ленинские горы, стр. 73, Москва, Россия*

³*Институт проблем технологии микроэлектроники и особо чистых материалов РАН, Черноголовка, Россия*

anb@inorg.chem.msu.ru

DOI: 10.26902/Graphene-23-067

Оксид графена зарекомендовал себя как перспективный 2D материал с самыми разнообразными применениями. В то же время нестабильность его свойств определяется химическим строением, включающим большое разнообразие кислородных групп. Для того, чтобы обеспечить стабильность транспортных свойств необходимо разработать способ контролируемого восстановления сетки двойных углеродных связей с одновременным замещением кислородных групп на более стабильные, например, содержащие гетероциклический азот или концевые фторидные группы.

В нашей работе был предложен способ восстановления оксида графена гидразином в присутствии плавиковой кислоты, чтобы происходило замещение кислородных групп на фторидные и азотсодержащие группы. Были показаны возможности создания планарных структур на основе оксида графена с использованием углеродных наночастиц для контроля фоторезистивного переключения в видимом диапазоне, а также варьирование переключений и проводимости структур с помощью различных режимов восстановления оксида графена.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФИ (грант №23-49-00159).

Особенности подготовки графена для создания микроструктур для токовых измерений и исследования магнитной анизотропии**И.И. Куркина, Д.В. Николаев, М.П. Петров***Северо-Восточный федеральный университет, Беллинского 58, Якутск, Россия
ii.kurkina@s-vfu.ru***DOI: 10.26902/Graphene-23-068**

Графен считается многообещающим материалом для спинтроники следующего поколения из-за его необычайной подвижности носителей, большой длины спиновой диффузии и слабой собственной спин-орбитальной связи. После первой демонстрации спинового переноса в графене [1] при комнатной температуре стало понятно, что этот материал важен как для фундаментальной спинтроники, так и для будущих приложений.

Спинтроника представляет собой быстро развивающуюся область, которая внесет значительный вклад в развитие нанoeлектроники. За счет того, что спинтроника основана на использовании собственного спина электрона и связанного с ним магнитного момента в дополнении к заряду электрона для передачи информации, характеристики устройств электроники могут быть улучшены: повышена скорость вычислений и понижено энергопотребление.

Несмотря на то, что проделано много работы в этой области, большинство из ранних концепций не были реализованы экспериментально. Причина этого в том, что еще нет идеальной материальной платформы, способной передавать спиновую информацию на большие расстояния при комнатной температуре. В связи с этим на графен, двумерные материалы и ван-дер-ваальсовы структуры на их основе возлагают большие надежды.

В настоящей работе будет сделан обзор экспериментальных структур для спиновой электроники, включающих в себя слои графена, выявлены особенности подготовки графена для создания микроструктур для токовых измерений и исследования магнитной анизотропии, продемонстрированы результаты получения и синтеза графена микромеханическим, электростатическим и CVD методами.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 23-79-00065, <https://rscf.ru/project/23-79-00065/>.

[1] Tombros N., Jozsa C., Popinciuc M. et al. // Nature. 2007. V. 448. P. 571–574.

Влияние структуры кокса подложки на смятие нанопластинок графитаА.В. Дмитриев¹, Н.В. Пыхова¹, Б.А. Кульницкий²¹ЧелГУ, 454001 Челябинск, Россия²ТИСНУМ, 620108 Москва, Россия

avdm@yandex.ru

DOI: 10.26902/Graphene-23-069

Слоистый материал получили распределением расплава каменноугольного пека по поверхности сот терморасширенного графита (ТРГ). Провели вариацию соотношений пек/ТРГ, температуры окисления пека и плотности заготовок. Пек в заготовках 1 и 4 окисляли при 250 °С, в заготовке 3 при 220 °С, в заготовке 2 не окисляли. Заготовки 1, 3 и 4 прессовали при давлении выше текучести пека, заготовку 2 прессовали до плотности менее 0.3 г/см³. Материал спрессованных заготовок имеет слоистую структуру из стенок сот терморасширенного графита, толщиной 5.3 нм, прослоенных пеком или коксом из него [1]. Результаты определения физико-механических свойств заготовок и кристаллической структуры стенок сот ТРГ приведены в таблице. Усадка заготовки 4 составляет ~ 14% линейных из-за неграфитируемости кокса, при графитируемости кокса в остальных заготовках много меньше. Усадки заготовок приводят к увеличению межплоскостное расстояние d_{002} , и это снизило вычисленные степень графитации γ и размер блоков мозаики перпендикулярно слоям L_c .

№ заготовок	Плотность заготовки, г/см ³	Состав в %, пек/ТРГ	Вид кокса	d_{002} , нм	γ	L_c , нм
1	1.2	92/2	Окисленный пек	0.3364	0.884	29.6
2	0.25	50/50	Графитируемый	0.3369	0.84	21.8
3	Пористый кокс	92/2	Графитируемый	0.3373	0.78	23.4
4	1.5	92/2	Неграфитируемый	0.3373	0.78	13.3

Слоистая структура приводит к сжатию стенок сот ТРГ после обжига заготовок и препятствует образованию ряби. На результаты вычислений L_c , можно полагать, влияют размеры блоков мозаики в параллельном слоям направлении, и в материале заготовки 4 они снизились.

[1] Дмитриев А. В. // ХТТ. 2013. Т. 47, № 6. С. 48.

Муаровые структуры на основе 2D гексагональных слоев: свойства и приложения

Л.А. Чернозатонский, А.И. Кочаев, В.А. Демин, А.А. Артюх, А.Д. Волков, К.Г. Катин,
М.М. Михайлов

*Институт биохимической физики РАН, Косыгина ул. 4, Москва 119334, Россия
chernol-43@mail.ru*

DOI: 10.26902/Graphene-23-070

Рассматриваются новые двумерные муаровые структуры, состоящие из функционализированных бислоев нитридов MN (M = Al, B, Ga) [1-2] и графен/MN [3], свернутыми под углом θ . Монослои удерживаются вместе химическими межслоевыми связями атомов. Рассматриваемые муаровые пленки являются полупроводниками со специфической зонной картиной с резонансными особенностями плотности электронных и фононных состояний, отражающих сверхрешеточную атомную структуру. Выявлены уплощенные разрешенные минизоны, непосредственно примыкающие к валентной зоне и зоне проводимости в диэлектрической щели спектров ранее несвязанных слоев. Их резонансный характер должен проявляться в вольт-амперных характеристиках таких пленок, что позволит создавать нано- и оптоэлектронные устройства с новыми свойствами, которые отличаются от существующих.

Поскольку в муаровых структурах можно менять резонансные пики плотности электронных состояний путем приложения внешних механических напряжений и поперечного электрического поля [4], интересно использовать этот эффект в изученных пленках в нелинейной оптике.

Гидрированные и фторированные муаровые структуры имеют сильное различие в упругих свойствах, что позволит использовать эту особенность в электромеханических наноразмерных устройствах. Рассмотрены также свойства диамон-подобных (F/H) структур на основе скрученного под близким к 30° углом бислоя при его функционализации с одной стороны легкими атомами, а с другой - молекулярно связанного с подложкой [5]. Наличие неспаренных электронов на этой поверхности приводит к появлению высокой спиновой поляризации в виде спиновой сверхрешетки. Эти особенности делают эти структуры перспективными в области спинтроники.

В силу отсутствия центра инверсии такие материалы являются пьезоэлектриками, поэтому их изучение представляется перспективным для применения в механо-электрических устройствах.

Некоторые из рассмотренных структур с непрямыми зонными переходами интересны для изучения динамики экситонов и использование их в спин-поляризованной оптике.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ (грант № 22-22-01006).

- [1] Chernozatonskii L.A., Katin K.G., Kochaev A.I. et al. //ASS. 2022. V. 606. P. 154909.
- [2] Chernozatonskii L.A. et al. //Appl. Surf. Sc. 2023 (submitted).
- [3] Demin V. A., Chernozatonskii L. A. //Nanomaterials. 2023. V.13, №. 5. P. 841.
- [4] Chernozatonskii L.A., Artyukh A.A., Kvashnin A.G., Kvashnin D.G. //ACS Appl. Mater. Interfaces. 2020. V. 12. P. 55189-55194.
- [5] Chernozatonskii L.A, Demin V.A, Kvashnin D.G //JPCL. 2022. V. 13, № 24. P. 5399-5404.

Реализация гидродинамического режима электронной жидкости при оптическом возбуждении графеновых сверхрешеток

В.Ю. Качоровский, С.О. Поташин, Л.Е. Голуб, В.В. Бельков, С.Д. Ганичев
 ФТИ им. А.Ф. Иоффе, Санкт-Петербург, Россия
 kachor.valentin@gmail.com

DOI: 10.26902/Graphene-23-071

Экспериментально обнаружен и теоретически описан dc фотоотклик асимметричной сверхрешетки (double grating gate structure) на основе двухслойного графена на терагерцовое излучение [1,2]. Подробно исследована зависимость фототока j_{dc} от частоты излучения ω . Разработана теория, наглядно демонстрирующая переход от режима дрейф-диффузия (DD) к гидродинамическому (HD) режиму с увеличением темпа электрон-электронных столкновений. Ключевым предсказанием является качественно различная частотная зависимость тока в этих режимах: медленная зависимость, $j_{dc} \propto 1/\omega^2$ в DD режиме (при больших ω), и гораздо более резкая зависимость, $j_{dc} \propto 1/\omega^6$, в HD режиме. Теоретические предсказания очень хорошо согласуются с экспериментом (см. Рис. 1a и Рис. 1b). Также изучен dc фотоотклик в магнитном поле в режиме шубниковских осцилляций. Показано, что поле приводит к гигантскому (на два порядка) увеличению j_{dc} . Изучен циклотронный резонанс (CR) и его вторая гармоника, а также исследована роль плазмонных эффектов, которые приводят к возникновению магнетоплазмонного резонанса (MP) (см. Рис. 1c). Наблюдаемое в эксперименте сильное подавление второй гармоники CR также указывает на реализацию гидродинамического режима.

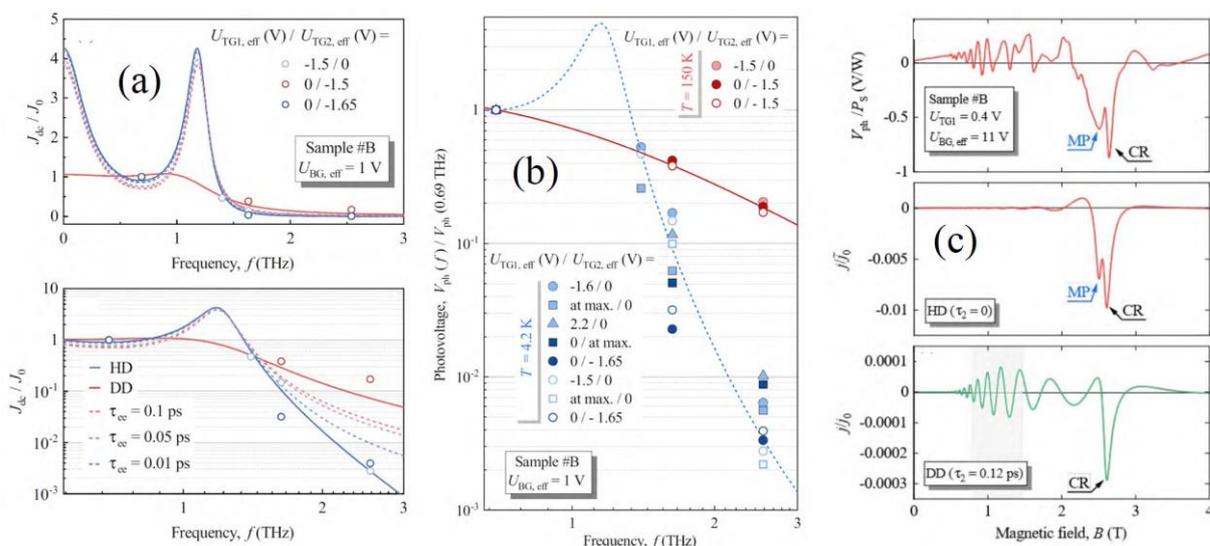


Рис. 1: (a) Зависимость $j_{dc}(\omega)$ в HD (синий цвет) и DD (красный цвет) режимах (top – обычный масштаб, bottom – логарифмический масштаб); (b) Зависимость $j_{dc}(\omega)$ при $T = 150$ К – красный цвет и при $T = 4.2$ – синий цвет; (c) Экспериментальная зависимость тока от магнитного поля при $f=2.54$ ТГц (top), HD теория (center), DD теория (bottom).

Работа выполнена при поддержке РФФ 20-12-00147.

[1] Mönch E., Potashin S.O., Lindner K. et al. // Phys. Rev. B. 2022. V. **105**. P. 045404.
 [2] Mönch E., Potashin S.O., Lindner K. et al. // Phys. Rev. B. 2023. V. **107**. P. 115408.

Исследование образования алмазных плёнок нанометровой толщины из графена**П.Б. Сорокин***Национальный исследовательский технологический университет «МИСиС»,**Ленинский пр. 4, стр. 1, Москва, Россия**pbsorokin@isis.ru***DOI: 10.26902/Graphene-23-072**

Двумерный алмаз или диаман [1] представляет собой интересную низкоразмерную структуру, имеющую привлекательные физико-химические свойства и перспективу применения в различных областях физики, начиная от нанооптики и заканчивая квантовыми вычислениями [2]. Однако синтез двумерного алмаза представляет собой крайне сложную задачу, поскольку требует применения особых подходов. Наиболее перспективным способом получения диамана представляется осаждение на поверхность многослойного графена сторонних атомов (например, водорода). В этом случае слои графена стремятся соединиться друг с другом с формированием искомой sp^3 -гибридизированной структуры [3]. Тем не менее, данный подход требует дальнейшего детального исследования и решения множества проблем.

В данном докладе я расскажу, что дефекты в структуре графена могут влиять на соединение слоёв и приводить к формированию особых двумерных алмазоподобных структур. Например, в случае одномерных дефектов (дислокаций), соединение слоёв может привести к формированию алмазной плёнки содержащей разные поверхности [4]. К подобным результатам может привести и соединение слоёв повёрнутого графена. С другой стороны, использование для осаждения различных атомов и молекулярных групп может также влиять на конечную алмазную структуру, как было показано для случая осаждения кислородсодержащих групп [5]. Это говорит о необходимости тщательного контроля экспериментальных условий при синтезе диамана. Тем не менее, наши последние экспериментальные результаты [6] позволяют надеяться, что алмазные плёнки всё же в итоге будут получены и займут своё место среди наиболее перспективных углеродных материалов.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ (грант № 21-12-00399).

[1] Чернозатонский Л.А. и др. // Письма в ЖЭТФ. 2009. Т. 90, № 2. С. 144–148.

[2] Sorokin P.B., Yakobson B.I. // Nano Lett. 2021. V. 21, № 13. P. 5475–5484.

[3] Kvashnin A.G. et al. // Nano Lett. 2014. V. 14, № 2. P. 676–681.

[4] Varlamova L.A., Erohin S.V., Sorokin P.B. // Nanomaterials. 2022. V. 12, № 22. P. 3983.

[5] Varlamova L.A. et al. // J. Phys. Chem. Lett. 2022. V. 13. P. 11383–11390.

[6] Emelin E.V. et al. // Nanomaterials. 2022. V. 12, № 24. P. 4408.

Геликоидальные кристаллы: зонная структура, мультикритическое поведение и топологические дефектыР.А. Ниязов¹, Д.Н. Аристов^{1,2}, В.Ю. Качоровский¹¹ФТИ им. А.Ф. Иоффе, 194021, Политехническая ул., 26, Санкт-Петербург²НИЦ КИ - ПИЯФ, 188300, Орлова роща, 1, Гатчина

niyazov_ra@npri.nrcki.ru

DOI: 10.26902/Graphene-23-073

Рассмотрен геликоидальный кристалл (ГК) на основе туннельно-связанных краевых состояний, возникающих в массиве упорядоченных антиточек (АТ) в двумерном топологическом изоляторе [1]. Ранее были исследованы отдельные АТ [2]. Рассчитана зонная структура ГК для модели 1D массива, помещенного в магнитное поле. Показано, что при целых и полуцелых значениях магнитного потока через антиточку запрещенные зоны ГК закрываются. При малом отклонении магнитного потока от этих значений возникают массивные дираковские конусы (ДК), расстояние по энергии между которыми можно контролировать чисто электрическим способом (затворными электродами).

Электрон-электронное взаимодействие приводит к мультикритическому поведению ГК. Существуют три фазы в ренормгрупповом фазовом портрете системы: “независимые кольца”, “независимые плечи” и “спин-флип киральные каналы”.

При наличии дефектов в ГК, например, стенки между областями колец с большим и малым радиусом, возникает пара локализованных состояний (топологически-защищенный кубит) с энергиями, лежащими в середине запрещенных зон массивных ДК. Расщепление между уровнями энергий кубита можно контролировать как магнитным полем, так и чисто электрически. Такие состояния можно использовать для квантовых вычислений.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ (грант № 20-12-00147).

[1] Ziegler J., Quantum transport in HgTe topological insulator nanostructures, PhD thesis, Universität Regensburg (2019).

[2] Niyazov R.A., Aristov D. N., Kachorovskii V. Y. // JETP Lett. 2021. V. 113. P. 689-700.

0D/2D гетероструктура органика/неорганика для оптических и фотонных приложенийД.Г. Квашнин¹, В.С. Байдышев², Е.В. Суханова¹, З.И. Попов¹, С.А. Евлашин²,
Ю.В. Бондарева²¹*Институт биохимической физики им. Н.М. Эмануэля РАН, 119334, ул. Косыгина 4,
Москва, Российская Федерация*²*Сколковский институт науки и технологий, 121205, Большой бульвар 30, стр 1, Москва,
Российская Федерация
kvashnin.dmit@yandex.ru***DOI: 10.26902/Graphene-23-074**

Стремительное развитие области синтеза двумерных материалов открывает новый путь для создания гетероструктур с желаемыми свойствами. Наиболее перспективными материалами для устройств нанoeлектроники в ближайшем будущем являются графен и гетероструктуры на его основе. Для расширения области применения графена необходимо создать механизмы контролируемой модификации его электронных и магнитных свойств. Предыдущие исследования показали, что это можно сделать различными методами, например, с помощью различных подложек, механических деформаций, химической функционализации, введения различных дефектов в структуру графена, формирования гетероструктур на основе графена.

Комбинируя различные двумерные (например, графен, BN) и квазидвумерные материалы (например, TMD), можно получить слоистые структуры с ван-дер-ваальсовым межслоевым взаимодействием. В таких материалах могут не только сохраняться свойства отдельных компонентов, но и появляться новые уникальные особенности. Отдельной перспективной областью исследований является создание комбинированных гетероструктур на основе органических и неорганических соединений. Уникальные свойства двумерных материалов в сочетании с электронной структурой органических молекул приводит к появлению уникальных эффектов на границе раздела органика/неорганика [1-3], что создает новую платформу применения таких гибридных материалов в качестве элементов оптических и газовых сенсоров, устройств памяти, гибких (носимых) электронных устройств и др.

В работы были представлены исследования эффективного способа модификации физико-химических свойств 2D структур с помощью функционализации органических соединений и неорганических 2D материалов, таких как графена, оксид графена, MoS₂ и др. [4,5]. Рассмотрены особенности атомной структуры и физико-химических свойств в паре с возможными способами перестройки магнитных свойств и сдвига спектров поглощения в видимый диапазон длин волн.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ (проект № 21-73-10238).

- [1] Wang J, Ji Z., Yang G., Chuai X. et al. // Adv. Funct. Mater. 2018. V. 28, № 51. P. 1806244.
- [2] Xu X., Lou Z., Cheng S. et al. // Chem. 2021. V. 7, № 11. P. 2989–3026.
- [3] Lee G.-H., Lee C.-H., van der Zande A.M. et al. // APL Materials. 2014. V. 2. P. 092511.
- [4] Sukhanova E.V., Kvashnin D.G., Popov Z.I. // Nanoscale. 2020. V. 12. P. 23248–23258.
- [5] Sukhanova E.V., Popov Z.I., Kvashnin D.G. // Jetp Lett. 2020. V. 111. P. 627–632.

Карбоксильная функционализация N-МУНТ с дефектами Стоуна-Уэльса и возможность волнового механизма диффузии при доставке HIF-1 α белка
 Н.Г. Бобенко¹, В.В. Шунаев², П.М. Корусенко³, В.Е. Егорушкин¹, О.Е. Глухова²

¹*Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, пр. Академический 2/4, Томск, Россия*

²*Саратовский национальный исследовательский государственный университет имени Н. Г. Чернышевского, ул. Астраханская, 83, Саратов, Россия*

³*Санкт-Петербургский государственный университет, Университетская набережная, Санкт-Петербург, 199034*
nbobenko@ispms.ru

DOI: 10.26902/Graphene-23-075

Легированные азотом многослойные функционализированные углеродные нанотрубки (N-МУНТ) широко используются для доставки лекарств. Доставка белка HIF-1 α , является важной задачей, так как его недостаток или избыток приводит к онкологическим, сердечно-сосудистым и другим заболеваниям. Для определения эффективности использования N-МУНТ, трубки синтезированы методом каталитического химического осаждения из паровой фазы и функционализированы COOH- после облучения ионами аргона [1]. Детальная информация о химическом состоянии, локальной структуре материала, типах структурных дефектов (образование кристаллитов и дефектов Стоуна-Уэльса) получена с использованием методов Рамановской спектроскопии, HRTEM, XPS и NEXAFS. Теоретически показано, что наличие дефектов Стоуна-Уэльса значительно уменьшает потенциальные барьеры и облегчает присоединение COOH- групп к поверхности нанотрубок [1]. Основную роль в функционализации, диффузной релаксации, регуляции кислорода и возможности доставки лекарств играет гибридизация электронных состояний. Природа волновой диффузии определяется гибридизацией OH белка и O=C карбоксильной группы. Наиболее подходящими для доставки лекарств являются COOH-N-МУНТ с 6 ат.% кислорода в карбоксильных группах.

Работа выполнена в рамках государственного задания ИФПМ СО РАН, номер FWRW-2022-0002, а также за счет гранта Российского научного фонда (грант № 21-72-10029).

[1] Shunaev V.V., Bobenko N.G., Korusenko P.M. et al. //Int. J. Mol. Sci. 2023. V. 24. P. 1296.

Структурный беспорядок определяет низкотемпературное поведение и гистерезис теплоемкости в УНТ

А.Н. Пономарев, Н.Г. Бобенко, В.Е. Егорушкин
ИФПМ СО РАН, 634055, пр. Академический 2/4, г. Томск, Россия
alex@ispms.ru

DOI: 10.26902/Graphene-23-076

Углеродные нанотрубки (УНТ) обладают широким диапазоном тепловых свойств, определяемых структурой материала. Структура УНТ может иметь один или несколько слоев, это зависит от способа получения и последующей обработки трубок. Поверхность углеродных нанотрубок состоит из графеновых кристаллитов. Их размер, ориентация и плотность межкристаллитных границ определяют структурный беспорядок нанотрубок. Кристаллиты могут иметь доменную структуру типа кресло—зигзаг, сформированную в процессе получения трубок. Нами предложен механизм образования доменной структуры и исследовано ее влияние на температурное поведение теплоемкости $C(T)$ [1]. Доменная структура формируется в процессе синтеза как термодинамический фазовый переход при понижении температуры и наличии внутренних напряжений в нанотрубках. Анализ результатов рентгеновской дифрактометрии, рамановской спектроскопии и просвечивающей электронной микроскопии показали, что размеры доменов УНТ составляют от нескольких десятков до сотен нанометров. Уменьшение размеров доменов в многослойных (МУНТ) по сравнению с однослойными (ОУНТ) трубках увеличивает граничную частоту фононного рассеяния и тем самым уменьшает на 10% вклад в теплоемкость решетки. Это определяет уменьшение $C(T)$ в МУНТ по сравнению с ОУНТ при температурах 0–100К. Плотность границ доменов МУНТ и неравновесные деформации определяет гистерезис теплоемкости [2]. Изгиб междоменных интерфейсов инициирует поток тепла и его диссипацию при охлаждении-нагреве, что приводит к гистерезису теплоемкости. Количество пиков гистерезиса соответствует количеству различных типов доменов, а величина гистерезиса определяется плотностью, линейными размерами и теплоемкостью этих доменов. Выявленные для УНТ зависимости теплоемкости и ее температурного гистерезиса от структурного беспорядка будут полезны при разработке термоэлектрических, термоинтерфейсных материалов, наножидкостей и материалов с тепловой памятью на их основе.

Работа выполнена в рамках государственного задания ИФПМ СО РАН, тема FWRW-2022–0002.

[1] Ponomarev A., Egorushkin V., Bobenko N. et al. // *Materials*. 2022. V. 15, № 2. P. 518.

[2] Bobenko N., Egorushkin V., Ponomarev A. // *Nanomaterials*. 2022. V. 12, № 18. P. 3139.

Квантово-химическое моделирование структуры и свойств диаманоподобных структур из монослоев графена и h-BN

В.А. Демин, Л.А. Чернозатонский

*Институт биохимической физики РАН, Косыгина ул. 4, Москва, Россия**victordemin88@gmail.com***DOI: 10.26902/Graphene-23-077**

Диаман [1] – двумерный углеродный материал, который может быть получен при адсорбции легких атомов на поверхности бислоенного графена. Модификации исходного бислоя, такие как поворот слоев друг относительно друга и замена одного из графенов на монослой гексагонального нитрида бора, приводят к существенному изменению структуры и свойств полученного диаманоподобного материала. В данной работе представлены результаты DFT моделирования новых стабильных диаманоподобных структур на основе муаровых бислоев графен/нитрид бора [2]. На основе наименьших соразмерных суперячеек, соответствующих G/h-BN бислоям с муаровыми углами $\theta=10.9^\circ$ и $\theta=25.3^\circ$ были построены модели гидрированных и фторированных гибридных диаманов.

Наличие адсорбированных атомов и межслоевых ковалентных связей приводит к разрушению π -системы графена, разбивая его на периодически расположенные СН «квантовые точки», превращая его спектр в набор разрешенных минизон вблизи уровня Ферми, с открытием запрещенной зоны от 2.5 до 3.1 эВ. Ее величина зависит от типа и количества адсорбированных атомов, а также от муарового угла исходных бислоев. Варьирование этих параметров позволяет точную настройку электронных свойств нового материала. Рассмотренные гибридные диаманы могут стать основой для приложений в устройствах нового поколения.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ (грант № 22-22-01006).

[1] Chernozatonskii L.A., Sorokin P.B., Kvashnin A.G. et al. //JETP Lett. 2009. V. 90, № 2. P. 144-148.

[2] Demin V.A., Chernozatonskii L.A. //Nanomaterials. 2023. V.13, № 5. P. 841.

Исследование нуклеации алмаза в графите на атомном уровне с помощью современных методов моделирования

С.В. Ерохин,¹ К. В. Ларионов,¹ М.А. Буйлова,² П.Б. Сорокин¹

¹Национальный исследовательский технологический университет «МИСИС», 119049, Москва, Ленинский пр-кт, д. 4, стр. 1, Россия

²Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет), 141701, Московская область, г. Долгопрудный, Институтский переулок, д.9, Россия
erohin.sv@misis.ru

DOI: 10.26902/Graphene-23-078

Исследования механизма прямого превращения графита в алмаз проводятся уже более 30 лет [1-4], и тем не менее всё ещё остаются вопросы относительно промежуточных стадий и путей трансформации фаз. При высоких давлениях и температурах алмаз возникает в графите по нуклеативному механизму [3], однако изучение промежуточных фаз является затратным. Вместо этого можно использовать компьютерное моделирование, но минимальные устойчивые зародыши могут иметь большие размеры и содержать 10^4 - 10^6 атомов из-за отличий в параметрах решёток алмаза и графита.

Компьютерное моделирование, которое могло бы помочь проверить данную гипотезу, затруднено из-за неспособности эмпирических потенциалов точно описать энергетику превращения [2-4], в то время как вычислительные затраты не позволяют использовать более надежные методы теории функционала плотности (ТФП). С другой стороны, машинное обучение позволяет создавать потенциалы (ML-потенциалы), которые описывают взаимодействия с точностью методов ТФП, а время расчётов масштабируется линейно с числом атомов, позволяя моделировать 10^4 - 10^6 атомов в структурах.

В данном исследовании мы сосредоточились на изучении процесса нуклеации алмаза в графите, начиная с формирования тонких слоев алмаза. Затем мы использовали компьютерное моделирование и тренировали ML-потенциалы для наиболее полного представления потенциальных взаимодействий в моделях зародышей алмаза в графите. Потенциал МТР типа был выбран в качестве потенциала машинного обучения. С помощью него было проведено изучение роста алмаза в матрице графита, путём расчёта термодинамического потенциала Гиббса. Далее было получено аналитическое уравнение, описывающее изменение энергии Гиббса при увеличении размеров зародыша, которое позволило определить барьеры нуклеации при различных давлениях.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда в соответствии с научно-исследовательским проектом № 22-72-00138. Расчёты проводились на суперкомпьютерном кластере ЦКП «Центр данных ДВО РАН», а также кластере, предоставленном лабораторией моделирования и разработки новых материалов НИТУ "МИСиС".

[1] Khaliullin R.Z. et al. // Phys. Rev. B. 2010. V. 81, № 10. P. 100103.

[2] Khaliullin R.Z. et al. // Nat. Mater. 2011. V. 10, № 9. P. 693–697.

[3] Luo D. et al. // arXiv:2111.13382 [cond-mat]. 2021.

[4] Bartók A.P. et al. // Phys. Rev. Lett. 2010. V. 104, № 13. P. 136403.

Квантово-классическое описание плазмонов с переносом заряда в металлических наночастицах на графенеА.С. Федоров^{1,2}, Е.В. Еремкин¹, П.О. Краснов¹, В.С. Герасимов^{1,3}, С.П. Полдютов¹¹Международный научно-исследовательский центр спектроскопии и квантовой химии, 660041, г. Красноярск, пр. Свободный, 79, Россия²Институт физики им. Л.В.Киренского СО РАН, Академгородок 50/38, 660036, Красноярск, Россия³Институт вычислительного моделирования СО РАН, Академгородок, 50/44, 660036, Красноярск, Россия
qchem99@yandex.ru**DOI: 10.26902/Graphene-23-079**

Терагерцовое (ТГц) излучение, находящееся между инфракрасным и микроволновым, в настоящее время начинает интенсивно применяться во многих областях нанотехнологий и фотоники. Это объясняется тем, что оно способно проникать через различные материалы с небольшим затуханием, такие как бумага, пластик, и т.д., которые обычно непрозрачны в оптическом диапазоне. Данная технология теперь используется в самых разных областях: обнаружение наркотиков и взрывчатых веществ, проверка безопасности, спектроскопия и технология передачи изображений [1]; биология и медицинские науки, контроль при обнаружении скрытых объектов, мониторинг окружающей среды и др. [2].

В работе с помощью оригинальной гибридной квантово-классической модели изучены свойства плазмонов с переносом заряда (СТР) комплексов металлических наночастиц (NPs) на поверхности однослойного графена. В предположении, что плотность носителей заряда в легированном графене существенно не изменяется при плазмонных колебаниях, получены уравнения, описывающие плазмонные частоты и собственные векторы СТР, т. е. амплитуды осциллирующих зарядов для каждой наночастицы на графене. Частоты и собственные векторы КТП, рассчитанные для нескольких различных геометрий комплексов наночастиц на графене, показывают, что частоты СТР лежат в терагерцовом диапазоне и могут быть представлены как произведение множителя, определяемого уровнем Ферми графена и множителем, определяемый геометрией NPs. Полученные результаты для простой геометрии были подтверждены расчетами методом конечных разностей во временной области (FDTD -Finite Difference Time Domain).

С помощью предложенной модели рассчитаны добротности Q таких систем и определено, что они имеют максимальные значения ~5–10. Разработанная квантово-классическая модель позволяет моделировать СТР в данных системах на 3-4 порядка быстрее по сравнению с методом FDTD, расширяя возможности для предсказания свойств очень больших систем, которые могут быть изготовлены с помощью современных методов синтеза, включая нанолитографию.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации, проект FSRZ-2023-0006.

[1] Tonouchi M. // Nature Photon. 2007. V. 1. P. 97–105.

[2] Lee Y.-S. Principles of Terahertz Science and Technology; Springer US, 2009.

Магнитные гетероструктуры на основе графена и других двумерных материалов

К.В. Ларионов, Х.Х. Паис Переда, П.Б. Сорокин
НИТУ МИСИС, Ленинский пр-т, 4, Москва, Россия
konstantin.larionov@phystech.edu

DOI: 10.26902/Graphene-23-080

Методами ТФП в работе теоретически изучены свойства магнитных гетероструктур на основе монослоев графена [1], *h*-BN, MoSe₂ [2] и MoS₂ [3] с полуметаллическим ферромагнитным сплавом Гейслера Co₂FeGe_{1/2}Ga_{1/2} (CFGG). Рассмотрены две термации поверхности пленки CFGG: атомами кобальта или атомами железа/германия/галлия. Показано сохранение ферромагнетизма в плёнке полуметалла, а также описан эффект увеличения магнитного момента вблизи поверхности. Анализ плотности электронных состояний продемонстрировал быстрое восстановление полуметаллических свойств CFGG вблизи границы раздела. Более того, в случае Co-терминированной гетероструктуры графен/CFGG и *h*-BN/CFGG получено 100% значение спиновой поляризации на первом атомном слое CFGG. Методом неравновесных функций Грина выполнен расчет спин-транспортных свойств в туннельной магнитной гетероструктуре CFGG/MoS₂/CFGG. Получены спектры проводимости, свидетельствующие о сохранении полуметаллических свойств электродов, а также рассчитаны значения коэффициента туннельного магнетосопротивления в диапазоне 10⁴-10⁵%, в зависимости от числа промежуточных туннельных слоев и величины приложенного напряжения.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ (грант № 23-79-01298).

Лаборатория цифрового материаловедения была создана в рамках выполнения проекта программы стратегического академического лидерства “Приоритет-2030” Проект К6-2022-041.

[1]. Li S. et al. // Adv. Mater. 2019. V. 32, № 6. P. 1905734.

[2]. Larionov K.V. et al. // Phys. Chem. Chem. Phys. 2022. V. 24, № 2. P. 1023–1028.

[3]. Larionov K.V. et al. // ACS Appl. Mater. Interfaces. 2022. V. 14, № 49. P. 55167–55173.

Электрон-электронные взаимодействия в низкоразмерных квантовых структурахК.В. Бухенский¹, А.Б. Дюбуа¹, А.Н. Конюхов¹, С.И. Кучерявый², А.С. Сафошкин¹¹Рязанский государственный радиотехнический университет им. В.Ф. Уткина, 390005,
ул. Гагарина, д. 59/1, Рязань, Российская Федерация²Обнинский институт атомной энергетики Национального исследовательского ядерного
университета МИФИ, 249039, тер. Студгородок, д. 1, г. Обнинск, Калужская область,
Российская Федерация

Dubois.a.b@rsreu.ru

DOI: 10.26902/Graphene-23-081

Работа направлена на выяснение вклада внутриволновой и межволновой электрон-электронной релаксации в затухание квантования Ландау осцилляций поперечного магнитосопротивления. Для сильнолегированного гетероперехода, аппроксимированного треугольным потенциальным профилем, когда заполнены основная и возбужденная подзоны размерного квантования, получены выражения параметрических зависимостей от температуры, которые объясняют экспериментальные зависимости [1, 2].

В ряде экспериментальных работ по исследованию особенностей осцилляций поперечного магнитосопротивления Шубникова – де Гааза в широком диапазоне температур и магнитных полей для объемных 3D и двумерных 2D электронов обнаружены некоторые аномалии. Например, была обнаружена осциллирующая зависимость температуры Дингла, а, следовательно, и времени малоугловой релаксации, от температуры. Эти осцилляции были обнаружены для сильнолегированных гетеропереходов ($n_s > 8.5 \cdot 10^{11} \text{ см}^{-2}$), в которых заполнена основная и вторая возбужденная подзона размерного квантования. Была установлена однозначная связь этих аномалий с сильным электрон-электронным взаимодействием [3]. Для качественного и количественного объяснения наблюдаемых эффектов рассмотрены каналы электрон-электронных взаимодействий в сложной системе 2D вырожденных электронов. Окончательные зависимости времени электрон-электронного взаимодействия рассчитывались в соответствии с правилом Маттиссена [4].

[1] Дюбуа А.Б. и др. // Вестник РГРТУ. 2013. Т 3, № 45. С.88-92.

[2] Ambartsumyan V.A. et al. // Nanosystems: physics, chemistry, mathematics. 2014. V. 5, № 3. P.343-353.

[3] Vaukov A.A. et al. // J. Phys.: Conf. Ser. 2017. V. 941. P. 012059.

[4] Дюбуа А.Б., Кучерявый С.И., Сафошкин А.С. // Известия вузов. Физика. 2021. Т. 64, № 4. С. 163-169.

Композиты на основе скомканного графена: атомистическое моделирование

Ю.А. Баймова, Л.Р. Сафина, К.А. Крылова, Р.Т. Мурзаев, П.В. Полякова

*Институт проблем сверхпластичности металлов РАН, ул. Степана Халтурина 39, Уфа, Россия**julia.a.baimova@gmail.com***DOI: 10.26902/Graphene-23-082**

Как известно, углеродные наноструктуры обладают исключительными механическими, электрическими, тепловыми свойствами. Графен, хорошо известный в настоящее время двумерный материал, дал свежую концепцию новых трехмерных (3D) структур со сложной архитектурой, изготовленных на основе графена. Такие материалы обладают высокой прочностью на растяжение, имеют малый вес и могут быть легко функционализированы другими химическими элементами или функциональными группами. Одним из примеров подобных структур является скомканый графен, который состоит из дефектных и/или смятых однослойных чешуек графена размером несколько нанометров. Между некоторыми чешуйками графена могут возникать новые химические связи, однако преобладают атомы углерода с sp^2 -гибридизацией. Атомы углерода с другим типом гибридизации, sp^3 или sp представлены в меньшем количестве. При этом размер и тип структурных единиц может существенно влиять на его физико-механические свойства.

В данной работе рассматриваются возможность использования такой структуры в качестве матрицы для композитного материала металл/графен [1]. Исследуются способы получения таких композитов, их механические свойства и теплопроводность. Показано влияние металла-наполнителя, количества металла и типа деформационно-термической обработки на механические свойства композитов.

[1] Safina L.R., Krylova K.A., Baimova J.A. // Mater. Today Phys. 2022. V. 28. P. 100851.

Первопринципное исследование электронного строения системы графен-политиофен

И.А. Федоров

Кемеровский государственный университет, ул. Красная 6, Кемерово, Россия

ifedorov@kemsu.ru

DOI: 10.26902/Graphene-23-083

Ван-дер-ваальсовы гетероструктуры на основе графена [1] имеют уникальные электронные характеристики, которые интересны для практического применения.

В данной работе для учета ван-дер-ваальсового взаимодействия использовалась схема DFT-D3(BJ). Ранее в рамках DFT-D2 было выполнено исследование зонного спектра системы графен-политиофен [2]. Для определения равновесной конфигурации исследуемой системы использовался пакет CRYSTAL17.

Корректный учет ван-дер-ваальсовых сил позволил определить равновесную конфигурацию исследуемой системы. Для анализа распределения электронной плотности использовался топологический анализ на основе теории Бейдера. Исследование разности электронных плотностей между системой графен-политиофен и ее компонентами позволило определить перераспределения электронной плотности.

Работа поддержана Министерством науки и высшего образования Российской Федерации (проект № FZSR-2020-0007 в рамках государственного задания № 075-03-2020-097/1).

[1] Novoselov K.S., Mishchenko A., Carvalho A. et al. // Science. 2016. V. 353, №. 6298. P. 1-25.

[2] Marsusi F., Fedorov I., Gerivani S. // J. Phys. Cond. Matter. 2018. V. 30. P. 035002.

Структурные и транспортные свойства пленок трехмерного топологического изолятора на основе халькогенидов висмута и сурьмы.

**Н.П. Степина¹, А.О. Баженов¹, В.В. Кириенко¹, Д.В. Ищенко¹, И.О. Ахундов¹,
А.С. Тарасов¹, В.А. Голяшов¹, Е.С. Жданов¹, О.Е. Терещенко¹, Е.С. Климова², К.А. Кох²,
А.С. Шумилин³, А.Ю. Кунцевич⁴**

¹*ИФП СО РАН, 630090, Новосибирск, Россия*

²*ИГМ СО РАН, 630090 Новосибирск, Россия*

³*ФТИ им Иоффе, 194021 Санкт-Петербург, Россия*

⁴*ФИАН им Лебедева, 119991 Москва, Россия*

nstepina@mail.ru

DOI: 10.26902/Graphene-23-084

Проведено исследование магнетосопротивления и эффекта Холла в пленках двух- и четырех-компонентного топологического изолятора на основе халькогенидов висмута и сурьмы (BSTS). Пленки выращены с помощью физического осаждения из газовой фазы молекулярно-лучевой эпитаксии на подложках слюды, кремния Si(111) и CVD - графене, перенесенном на подложку Si/SiO₂. Показано, что несмотря на то, что в проводимости двухкомпонентных пленок Bi₂Se₃, выращенных на графене, доминирует вклад объема, магнетосопротивление (МС) определяется как объемными, так и поверхностными состояниями. Вклад топологических поверхностных состояний структуры Si/SiO₂/графен/ТИ проявляется в эффекте слабой антилокализации (САЛ). При уменьшении толщины пленки от 50 до 20 нм происходит переход от эффекта САЛ, типичной для транспорта через поверхностные состояния трехмерного ТИ, к эффекту слабой локализации.

На пленках BSTS, выращенных на кремнии, обнаружено положительное МС, которое не насыщается вплоть до полей 12 Т и величина которого в малых полях превышает теоретические значения для САЛ. Высоко-полевая часть МС слабо чувствительна к направлению магнитного поля и может быть описана с учетом электрон-электронного взаимодействия, которое изменяется в магнитном поле за счет эффекта Зеемана из-за достаточно больших значений g-фактора для таких пленок.

Подробный анализ эффекта Холла показал, что коэффициент Холла немонотонен и сильно изменяется в слабых полях, причем величина его нелинейности зависит от концентрации носителей заряда и достигает 10-20% в образцах с низкой электронной плотностью. Эффект практически не зависит от температуры вплоть до 20 К. Для совместного описания МС и эффекта Холла предложена модель, основанная на открытии щели за счет эффекта Зеемана в дираковском спектре поверхностных состояний и соответствующем перераспределении транспортных потоков. Этот механизм совместно с эффектом слабой антилокализации и электрон-электронного взаимодействия позволяет качественно объяснить наблюдаемые экспериментальные эффекты.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ и правительства Новосибирской области (грант № 22-22-20074).

Моделирование адсорбции замещенных силатранов на Si-допированных графеновых поверхностях

С.А. Созыкин, И.Д. Юшина, Е.В. Барташевич

*Южно-Уральский государственный университет, пр. Ленина 76, г. Челябинск, Россия
sozykinsa@susu.ru***DOI: 10.26902/Graphene-23-085**

Использование силатранов [1] для функционализации поверхностей нашло широкое применение в задачах иммобилизации ферментов и других биомакромолекул. Силатраны демонстрируют интересные особенности химического связывания: во-первых, это внутримолекулярные, сравнительно сильные нековалентные связи Si...N, которые попадают под определение тетрельных связей; во-вторых, это способность к липофильным и гидрофильным межмолекулярным взаимодействиям.

Методами теории функционала плотности с периодическими граничными условиями была исследована сорбция хлорсилатрана на поверхности графена с разной степенью допирования атомами Si [2]. Наиболее сильному связыванию соответствовали те ориентации хлорсилатрана, в которых наблюдались взаимодействия с участием хлора и кислорода. В случае перпендикулярной ориентации связи Si...N хлорсилатрана относительно поверхности, более выгодными по энергии были те, где взаимодействия Si...N преобладали над взаимодействиями Si...H. Удерживанию хлорсилатрана на кремний-графеновой поверхности способствует существенное разнообразие нековалентных взаимодействий.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ (грант № 22-13-00170).

[1] Voronkov, M.G., Dyakov V.M., Kirpichenko S.V. // J Organomet. Chem. 1982. V. 233. P. 1.

[2] Nguyen D.K., Tran N.T.T., Chiu Y.H. et al. // Sci Rep. 2020. V. 10, № 1. P. 12051.

Двухслойный силицен на подложке SiC: исследование процессов литизации в молекулярно-динамической моделиО.Р. Рахманова^{1,2}, А.Е. Галашев^{1,2}¹*Институт высокотемпературной электрохимии Уральского отделения РАН, 620990, ул. Академическая, 20, Екатеринбург, Россия*²*Уральский федеральный университет, 620002, ул. Мира, 19, Екатеринбург, Россия
oksana_rahmanova@mail.ru***DOI: 10.26902/Graphene-23-086**

В молекулярно-динамической модели исследован процесс литизации системы «силицен/SiC» для возможного использования в качестве материала анода литий-ионных батарей (ЛИБ) нового поколения. Заполнение литием силиценового канала, расположенного на подложке SiC, проходило в вертикальном и горизонтальном направлениях в течение 1.51 нс при температуре 300 К. Листы силицена содержали дефекты различного размера: би-, три- и гексавакансии. В обоих случаях атомы лития преимущественно локализовались вблизи силиценовых листов над центрами шестизвенных Si-колец. При этом средняя часть канала (пространство между листами) оставалась малозаполненной. В случае горизонтального заполнения атомы лития могли попадать в область между нижним листом силицена и SiC подложкой. Силицен оказывается менее стабильным при горизонтальном заполнении канала ионами Li⁺. При вертикальном запуске ионов наблюдается снижение флуктуаций коэффициента самодиффузии атомов лития по мере заполнения канала, т.к. атомы Li находят оседлое положение в канале, и их подвижность уменьшается. Рассчитанные значения коэффициентов самодиффузии атомов лития лежат в диапазоне 2.8–4.8·10⁻⁵ см²/с. Детальный анализ упаковок лития в системе «силицен/SiC» показал, что вертикальное заполнение канала приводит к более равномерному распределению лития по объему канала. Согласно теоретическим оценкам, удельная емкость анода «совершенный силицен/SiC», а также соответствующих анодов с би-, три- и гексавакансиями в силицене составляет: 1527.2, 1507.7, 1497.9 и 1468.1 мАч/г, соответственно. Таким образом, высокая емкость анода по отношению к адсорбции лития, гибкость слоев силицена, низкий энергетический барьер для диффузии лития делают анодный материал «силицен/SiC» перспективной основой для создания ЛИБ с высокой плотностью энергии.

Влияние морфологии полимерных композитов с углеродными наноструктурированными наполнителями на их электрофизические свойстваВ.А. Кузнецов^{1,2}¹*Институт неорганической химии им. А.В. Николаева СО РАН,
пр. Академика Лаврентьева, 3, Новосибирск, Россия*²*Новосибирский государственный технический университет,
пр. К. Маркса, 20, Новосибирск, Россия
vitalii.a.kuznetsov@gmail.com***DOI: 10.26902/Graphene-23-087**

Полимерные композиционные материалы на основе диэлектрических полимерных матриц и электропроводящих наноразмерных наполнителей представляют большой интерес для науки и техники. В зависимости от целевых функциональных свойств требуется создание композитов различной морфологии. Установление морфологии таких композитов является задачей нетривиальной, поскольку методы электронной микроскопии далеко не всегда могут дать исчерпывающую информацию о взаимном расположении наночастиц наполнителя в полимерной матрице. Зачастую микрофотографии представляют собой только лишь некоторое сечение образца, и не могут дать полной информации об объеме композита. Данную проблему можно решить с помощью исследования температурных зависимостей электросопротивления композитов, и дополнительно в некоторых случаях – с помощью исследования поведения электросопротивления композитов при их деформации. В рамках работы обсуждаются результаты исследования полимерных композитов сегрегированной сетчатой структуры с восстановленным оксидом графена в качестве электропроводящей фазы, композитов с равномерно распределенными в полимерных матрицах одностенными и многостенными углеродными нанотрубками, а также с равномерно распределенными в объеме композитов графитовыми наночастицами.

Электрохимические сенсоры на основе сеток из однослойных углеродных нанотрубок для использования в вольтамперометрическом анализе

Н.В. Иванова, Е.А. Мартынова, А.А. Рыскин, Е.А. Киликеева, М.В. Ломакин, А.И. Вершинина, О.Р. Гордая, И.М. Чиркова, С.Д. Шандаков
*ФГБОУ ВО «Кемеровский государственный университет»
ул.Красная, 6, г. Кемерово, Россия
sayganta@mail.ru*

DOI: 10.26902/Graphene-23-088

Создание миниатюрных сенсорных систем для качественного и количественного определения органических и неорганических веществ является важнейшим направлением развития современной аналитической химии. Работа посвящена разработке технологии изготовления и исследованию свойств и возможности применения в анализе электродов-сенсоров из сеток однослойных углеродных нанотрубок (ОУНТ). Волокна из сеток ОУНТ изготавливались методом «мокрого вытягивания» [1] и приводились в контакт с медной фольгой. Полученные гибкие электроды использовались в качестве индикаторных в трехэлектродной ячейке, их электрохимические свойства изучены методами циклической и инверсионной вольтамперометрии и хроноамперометрии в водных растворах различных электролитов. Выбраны условия предварительной подготовки электродов-сенсоров к анализу, обеспечивающие максимальный отклик. Показана возможность применения электродов на основе ОУНТ для вольтамперометрического определения содержания ионов ртути и мышьяка (III) в концентрациях на уровне ПДК, фенола, дофамина и аскорбиновой кислоты в физиологически значимых количествах, выбраны оптимальные условия регистрации вольтамперных кривых и рассчитаны метрологические характеристики разработанных методик анализа.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (проект № FZSR-2020-0007 в рамках государственного задания № 075-03-2020-097/1).

[1] Zhilyaeva M.A., Shulga E.V., Shandakov S.D. et al. // Carbon. 2019. V. 150. P. 69-75.

Влияние разориентации слоев в мультислойном твист графене на его транспортные свойстваО.В. Кононенко¹, В.Н. Матвеев¹, А.В. Зотов¹, А.А. Мазилкин²¹*Институт проблем технологии микроэлектроники и особо чистых материалов РАН, 142432, ул. Академика Осипьяна, 6, г. Черноголовка, Россия*²*Институт физики твердого тела РАН, 142432, ул. Академика Осипьяна, 2, г. Черноголовка, Россия
oleg@iptm.ru***DOI: 10.26902/Graphene-23-089**

Пленки мультислойного твист графена синтезировали на пленках железа методом CVD низкого давления с однократным напуском ацетилена. Структуру синтезированных пленок исследовали с помощью спектроскопии комбинационного рассеяния и просвечивающей электронной микроскопии высокого разрешения. Структура сверхрешеток Муара, выявленная с помощью электронной микроскопии высокого разрешения, зависит от углов разориентации графеновых слоев в пленке. Спектры комбинационного рассеяния также зависят от углов разориентации графеновых слоев. При малых углах разориентации (меньше 10°) отношение пиков 2D/G в спектрах меньше 1. При углах разориентации больше 20° отношение пиков 2D/G превышает 5 и может достигать 10. Исследование транспортных свойств пленок мультислойного твист графена с большими углами разориентации графеновых слоев (20-30°) показали высокую подвижность носителей заряда в таких пленках, которая достигала 50000 см² В⁻¹с⁻¹ при комнатной температуре и около 110000 см² В⁻¹с⁻¹ при 85 К. Таким образом, свойства пленок мультислойного твист графена с большими углами разориентации графеновых слоев близки к свойствам монослойного графена.

[1] Brzhezinskaya M., Kononenko O., Matveev V. et al. // *ACS Nano*. 2021. V. 15. P. 12358-12366.

[2] Kononenko O., Brzhezinskaya M., Zotov A. et al. // *Carbon*. 2022. V. 194. P. 52-61.

Применение h-BN в качестве адсорбента для очистки воды от лекарственных препаратов

Л.Ю. Сорокина, К.Ю. Котякова

*Национальный исследовательский технологический университет «МИСиС»,
Ленинский пр. 4, стр. 1, Москва, Россия**l.sorokina@isis.ru***DOI: 10.26902/Graphene-23-090**

В последнее время появление антибиотиков в источниках питьевой воды, очистных сооружениях питьевой воды и распределительных системах, а также рост распространения генов устойчивости бактерий к антибиотикам вызвало серьезную озабоченность. Загрязнение сточных вод антибиотиками является одной из серьезных социальных и экологических проблем в настоящее время. Наноматериалы с высокой удельной поверхностью являются перспективной платформой для высокоэффективных сорбентов различного класса загрязнителей. Гексагональный нитрид бора (h-BN) выделяется своими уникальными свойствами (нетоксичность, биосовместимость, повышенная термическая и химическая стабильность, способность к переработке, превосходная стойкость к окислению, высокая удельная поверхность), которые делают его хорошим адсорбентом. В данной работе мы разработали эффективную платформу на основе покрытия h-BN с высокой удельной поверхностью, образованного многочисленными нанопластинами. Эффективность удаления антибиотиков анализировали при различных начальных концентрациях антибиотиков в растворах, а также при разной степени кислотности растворов в течение 28 дней. Максимальная сорбционная емкость покрытий h-BN показывает превосходные результаты по сравнению с многими известными на данный момент адсорбентами. Потеря эффективности при повторном использовании покрытий составляет не более 5%, что подтверждает перспективность многократного использования. На основе расчетов теории функционала плотности были определены характер взаимодействия антибиотик-наночастица, сорбционная способность наногбридов на основе h-BN в отношении каждого класса антибиотиков, а также наиболее энергетически выгодные положения молекул лекарственных средств относительно поверхности носителя.

Работа выполнена при финансовой поддержке фонда РФФ № 21-79-10411.

Композиционные материалы с эффектом памяти формы на основе полибензимидазолов и графена

**Б.Ч. Холхоев¹, М.К. Рабчинский², З.А. Матвеев¹, С.А. Рыжков², П.Д. Червякова²,
В.Ф. Бурдуковский¹**

¹*Байкальский институт природопользования СО РАН, ул. Сахьяновой, 6, Улан-Удэ,
Российская Федерация*

²*Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе РАН, Политехническая ул., 26, Санкт-Петербург, Российская Федерация
holh_bat@mail.ru*

DOI: 10.26902/Graphene-23-091

Полимеры с памятью формы, а также композиты на их основе относятся к группе так называемых «умных» или адаптивных материалов, которые способны менять свою форму под воздействием различных стимулов – температуры, механической нагрузки, электричества, света, магнитного поля, химических веществ и т.д. Материалы на основе полимеров с памятью формы могут использоваться в различных областях, включая электронику, аэрокосмическую индустрию, инженерию, сенсорную, робототехнику и медицину.

Ранее нами была показана возможность получения алифатических полибензимидазолов (ПБИ), проявляющих термостимулируемый эффект памяти формы [1,2]. В настоящем докладе описываются новые функциональные полимерные композиционные материалы с памятью формы на основе представителя алифатических полибензимидазолов и аминированного графена. Обсуждается влияние содержания наполнителя на термические, физико-механические, термомеханические и электрофизические свойства композитов. Кроме того, представлены результаты исследования термически индуцированного и электростимулируемого эффекта памяти формы композиционных материалов.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант № 22-73-10011).

- [1] Kholkhoev B.Ch., Shalygina T.A., Matveev Z.A. et al. // Polymer. 2022. V. 245. P. 124676.
[2] Kholkhoev B.Ch., Matveev Z.A., Bardakova K.N. et al. // Polymers. 2022. V. 15, № 6. P. 3792.

Фотомемристивные состояния в двумерных кристаллах и гетероструктурах на их основе

Г.Н. Панин¹, Fu Xiao^{2,3,4}, О.О. Капитанова^{5,6}, Н.Д. Митюшев^{1,7}, А.Н. Баранов^{1,5}

¹*Институт проблем технологии микроэлектроники и особочистых материалов РАН, Академика Осипьяна, 6, г. Черноголовка, 142432 Московская область, Россия*

²*School of Physics and Optoelectronic Engineering, Hangzhou Institute for Advanced Study, University of Chinese Academy of Sciences, Hangzhou, China.*

³*State Key Laboratory of Infrared Physics, Shanghai Institute of Technical Physics, Chinese Academy of Sciences, Shanghai 200083, China.*

⁴*University of Chinese Academy of Sciences, Beijing 100049, China*

⁵*Химический факультет МГУ, Ленинские горы, 1, Москва 119991, Россия*

⁶*Центр фотоники и 2D-материалов МФТИ, Долгопрудный, 141701, Россия*

⁷*Факультет наук о материалах, МГУ, Ленинские горы, 1, Москва 119991, Россия
panin@iptm.ru*

DOI: 10.26902/Graphene-23-092

Рассмотрены фотомемристивные состояния в структурах на основе двумерных материалов, таких как графен, оксид графена, дисульфиды переходных металлов, для энергоэффективной автономной обработки визуальной информации [1]. Фотомемристивные состояния, управляемые поляризацией [2], окислительно-восстановительными процессами [3], сверхбыстрыми обратимыми фотоиндуцированными структурными переходами [4] демонстрируют динамическое поведение, необходимое для создания систем энергонезависимого детектирования [5,6], обработки и запоминание фотонаведенных состояний в самом фотодетекторе [7]. Показано, что фотомемристоры на основе графена, ван-дер-Ваальсовых гетероструктур и квантовых точек [8, 9] могут быть использованы для интеллектуального визуального детектирования в широком УФ-ИК диапазоне.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ (грант № 23-49-00159), РФФИ (грант №20-57-04010).

[1] G.N. Panin //Electronics 2022. V. 11. P. 619.

[2] W. Wang et al. //Sci Re. 2016. V. 6. P. 31224.

[3] О. О. Капитанова et al., //J. Mater. Sci. Technol. 2020. V. 38. P. 237.

[4] X. Fu et al. //Small, 2019. P. 1903809.

[5] G.N. Panin //Chaos, Solitons and Fractals 2021. V. 142. P. 110523.

[6] Xiao Fu et al. //Mater. Horiz. 2022. V. 9. P. 3095-3101.

[7] Fu, X. et al. // Light Sci Appl. 2023, V. 12. P. 39 (2023).

[8] Xiao Fu et al. //Nanoscale. 2017. V. 9 №. 5. P. 1820.

[9] N. N. Kovaleva et al. //2D Mater. 2019. V. 6. P. 045021.

Эластопроводимость графеновых нанолент в условиях малых пластических деформацийА.В. Аланкина, О.С. Лебедева, Н.Г. Лебедев*ФГАОУ ВО «Волгоградский государственный университет», 400062, проспект
Университетский 100, Волгоград, Россия
nikolay.lebedev@volsu.ru***DOI: 10.26902/Graphene-23-093**

Одна из ветвей нового научного направления стрейнтроники направлена на изучение деформационных эффектов в низкоразмерных структурах, например, семейства графена, что создаёт необходимые условия для развития гибкой электроники [1]. Графен относят к изотропным линейным упругим материалам при малых деформациях, подчиняющимся закону Гука. При больших деформациях наблюдаются отклонения от линейности, начинает проявляться свойство текучести, которое моделируется добавкой квадратичного по деформации слагаемого к линейному закону Гука [1].

В работе представлены результаты исследования эластопроводящих свойств графеновых нанолент (GNRs) с учётом малых пластических деформаций. Моделирование электронного строения графеновых нанолент с пластическими деформациями основано на геометрическом преобразовании элементарной ячейки GNR и соответственно зоны Бриллюэна в рамках метода сильной связи, подробно описанном в работе [2]. Деформация продольного растяжения (сжатия) рассматривается состоящей из обратимой, или упругой δ , и остаточной, или пластической δ_p , частей.

Сравнение результатов расчёта продольной компоненты тензора эластопроводимости M в режиме малых пластических деформаций показало появление различий по сравнению со случаем только упругих деформаций [2]. Наличие пластических деформаций приводит к качественному различию эластопроводимости графеновых нанолент с донорными и акцепторными примесями.

Исследование выполнено за счет средств гранта Российского научного фонда № 22-22-20048 (<https://rscf.ru/project/22-22-20048/>) и за счет средств бюджета Волгоградской области.

[1] Антонова И.В. // УФН. 2022. Т. 192, № 6. С. 609-641.

[2] Lebedeva O.S., Lebedev N.G., Lyapkosova I.A // J. Phys.: Cond. Matter. 2020. V. 32, №. 14. P. 145301.

Метод темплатной полимеризации на наполнителе для формирования композиционных аэрогелей

М.В. Гудков¹, П.Н. Бревнов¹, Н.Г. Рывкина¹, М.К. Рабчинский², М.В. Байдакова², Д.Ю. Столярова³, А.А. Гулин¹, К.А. Шиянова¹, В.Г. Крашенинников¹, М.А. Яговкина², Е.Д. Рябков⁴, А.Я. Горенберг¹, Л.А. Новокшопова¹, В.П. Мельников¹

¹ФИЦ ХФ РАН, ул. Косыгина, 4, Москва, Россия

²ФТИ им. А.Ф. Иоффе, ул. Политехническая, 26, Санкт-Петербург, Россия

³НИЦ «Курчатовский Институт», пл. Академика Курчатова, 1, Москва, Россия

⁴МИТХТ им. М.В. Ломоносова, Адрес, Москва, Россия

gudkovmv@gmail.com

DOI: 10.26902/Graphene-23-094

В данной работе предложен метод темплатной полимеризации для получения композиционных полимерных аэрогелей, основанный на синтезе полимера непосредственно на поверхности пор наполнителя, который одновременно выполняет роль темплата. Показано, что полученные аэрогели имеют улучшенные механические свойства, высокоразвитую пористую морфологию, настраиваемые электропроводность и гидрофобные свойства. Показано, что возможности метода позволяют точно контролировать толщину полимерного слоя на поверхности стенок аэрогеля, структуру и свойства полученных материалов. Также был предложен новый метод синтеза СВМПЭ, ранее не описанный в литературе. Показано, что количество вводимого таким образом полимера на поверхность стенок графенового аэрогеля можно варьировать в широких пределах (по крайней мере, от 10 до 94 масс.%). В то же время, варьируя количество полимерного компонента и, следовательно, толщину полимерного слоя, можно управлять электропроводностью, микроструктурой, механическими и гидрофобными свойствами. Высокое содержание СВМПЭ приводит к значительному упрочнению графенового аэрогеля: модуль Юнга увеличивается более чем в 200 раз. Описанный подход к получению аэрогелей универсален и может быть распространен как на другие полимерные материалы (в том числе со сверхвысокой молекулярной массой), так и на другие неорганические и органические матрицы. Разработанный подход открывает новые перспективы для получения аэрогелей из различных материалов, в том числе из тех, применение которых при получении аэрогелей традиционными методами затруднительно или вовсе невозможно.

Термическая модификация фторированного графита с внедренным NO_x
Г.И. Семушкина¹, Ю.В. Федосеева¹, А.А. Макарова², Д.В. Пинаков¹, Г.Н. Чехова¹,
А.Д. Федоренко¹, А.В. Окотруб¹, Л.Г. Булушева¹
¹ИИХ СО РАН, Новосибирск, Россия
²ICB, FUB, Берлин, Германия
semushkina.g@niic.nsc.ru

DOI: 10.26902/Graphene-23-095

Фторированный графит (ФГ) – трехмерный материал, состоящий из чередующихся слоев фторированного графена, слабо взаимодействующих между собой через силы ван-дер-Ваальса. Его высокая площадь поверхности и сродство к органическим адсорбатам делают его особенно эффективным материалом для адсорбции, отделения и очистки газов. Интеркаляция молекул-гостя в межслоевое пространство ФГ с варьируемой степенью фторирования была тщательно изучена и привела к использованию в качестве электрохимических детекторов и источников тока (топливные элементы, батарейки). В частности, фторированный графен показал высокую эффективность как сенсорный материал для обнаружения антропогенного загрязнителя - диоксида азота. Однако в настоящее время до конца не изучен механизм удаления молекул гостя из межслоевого пространства ФГ с различной степенью фторирования, что имеет решающее значение для оптимизации процесса детектирования и достижения желаемых свойств материала.

Таким образом, целью работы является проведение сравнительного анализа структурной и химической эволюции ФГ с различной степенью фторирования с внедренными молекулами оксида азота до и после отжига при 200 °С с использованием методов рентгеновской дифракции, ИК-спектроскопии, XPS и NEXAFS.

В этой работе мы провели комплексный анализ функционального состава, электронной структуры и стабильности NO_x@CF_y (y = 0.42, 0.38, 0.33, 0.23, 0.09) до и после отжига с использованием рентгеновской дифракции, ИК-спектроскопии, XPS и NEXAFS. Обнаружено эффективное удаление оксидов азота при 200 °С для NO_x@CF_y (y = 0.42 и 0.38) с уменьшением межслоевого расстояния ФГ в 1.5 раза. При отжиге матрица ФГ не дефторируется, но удаление молекул-гостя приводит к перераспределению атомов фтора с уменьшением доли sp²-гибридизированных углеродных областей. Отжиг образцов с меньшей концентрацией фтора NO_x@CF_y (y = 0.33, 0.23, 0.09) способствует окислению и внедрению атомов азота в ФГ слой. Для данного состава ФГ наблюдается слабая деинтеркаляция молекул-гостя из межслоевого пространства с преобладанием NO групп.

Гибкие мемристоры на основе композитного материала и отдельных частиц ядро-оболочка из фторированного графена с наночастицами V₂O₅А.И. Иванов¹, И.В. Антонова^{1,2}¹ИФП СО РАН, 630090, пр. Ак. Лаврентьева, 13, Новосибирск, Россия²Новосибирский государственный университет, 630090, ул. Пирогова, 2, Новосибирск, Россия

art.iv.il@mail.ru

DOI: 10.26902/Graphene-23-096

В настоящее время, мемристоры рассматриваются в качестве аппаратных аналогов биологических синапсов, воспроизводящих свойство пластичности биологических прообразов (изменяемой эффективности передачи сигнала между нейронами) и выполняющих одновременно функции хранения и обработки информации. На основе композитного материала состоящего из наночастиц V₂O₅ капсулированных фторированным графеном формируются мемристоры с биполярными переключениями и рекордно большой величиной изменения проводимости от закрытого состояния в открытое в 10⁹ раз. Обнаружено, что импульс напряжения длительностью около 30 нс и амплитудой 2.5 В приводит к переключению структуры в низкоомное состояние, а число циклов переключений составляет ~ 2x10⁶ без изменения соотношения токов в низко- и высокоомных состояниях. Отдельные наночастицы ядро-оболочка, состоящие из V₂O₅ размером ~5–7 нм, капсулированных фторированным графеном (слой толщиной до 2 нм), демонстрируют эффект резистивных переключений до 3–5-ти порядков. Количество измеренных переключений составляло ~ 10⁴, и было ограничено функциональными возможностями измерительного зонда, а не деградацией наночастиц. Реализация мемристоров из отдельных наночастиц обеспечивает основу для разработки сверхкомпактных, стабильных и высокопроизводительных нейронных чипов нового поколения [1]. Показано, что гибкость полностью напечатанных тестовые мемристорных структур на основе фторированного графена с наночастицами пентаоксида ванадия (ФГ/V₂O₅) ограничена деформациями 2%, при этом радиус изгиба составляет ~ 2.5 мм [2].

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ (грант № 22-19-00191).

[1] Ivanov A.I., Prinz V.Y., Antonova I.V. et al. // Phys. Chem. Chem. Phys. 2021. V. 23, №. 36. P. 20434-20443.

[2] Ivanov A.I., Antonova I.V // Flex. Printed Electronics. 2022. V. 7, №. 3. P. 035019.

Магнитотранспорт в графеноподобной полупроводниковой сверхрешеткеО.А. Ткаченко¹, В.А. Ткаченко^{1,2}, Д.Г. Бакшеев², О.П. Сушков³¹Институт физики полупроводников, пр. М.А.Лаврентьева, 13, Новосибирск, Россия,²Новосибирский государственный университет, ул. Пирогова 1, Новосибирск, Россия,³University of New South Wales, Sydney, 2052, Australia

vtkach@isp.nsc.ru

DOI: 10.26902/Graphene-23-097

Потенциал и остаточный беспорядок в графеноподобной решетке антиточек периодом 80–120 нм в индуцированном двумерном электронном газе (ДЭГ) нелегированных структур с квантовой ямой GaAs/AlGaAs промоделированы феноменологически [1,2], а также из расчетов трехмерной электростатики устройств с перфорированным и верхним металлическими затворами. Расчет потенциала сделан в локальном приближении по плотности состояний в ДЭГ с учетом квантования Ландау. Расчет магнитотранспорта в формализме Ландауэра-Бьюттикера для заданного или вычисленного потенциалов при разных амплитудах модуляции и беспорядка показывает, что при $|B| \sim 1$ Тл происходит выход на длинные плато квантового эффекта Холла (КЭХ): $R_{xy} = \pm h/2e^2$ ($R_{xy} = 0$). В переходе между этими плато на зависимостях $R_{xy}(B)$ есть средний наклон, отвечающий электронной проводимости, а на его фоне присутствуют осцилляции с периодом в квант магнитного потока на площадь элементарной ячейки решетки. На вычисленных зависимостях $R_{xx}(B)$ и плотности состояний $DOS(B)$ есть аналогичные осцилляции, причем, в $DOS(B)$ они проникают глубоко внутрь строгих плато КЭХ, что отличает данный КЭХ от обычного в ДЭГ. Величина коэффициента Холла R_H при $B=0$ зависит от силы длинноволнового беспорядка, но знак R_H соответствует типу носителей (электроны или дырки), который ожидается из закона дисперсии.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант № 19-72-30023).

[1] Ткаченко О.А., Ткаченко В.А., Бакшеев Д.Г., Сушков О.П. // Письма в ЖЭТФ. 2022. Т. 116, № 9. С. 616-620.

[2] Ткаченко О.А., Ткаченко В.А., Бакшеев Д.Г., Сушков О.П. // Письма в ЖЭТФ. 2023. Т. 117, №. 3. С. 228-234.

**Ультратрабыстрые оптические и терагерцовые свойства
одномерных Ван-дер-Ваальсовых наноматериалов****М.Б. Бурданова^{1,2}**¹*Московский физико-технический институт, 141701, Московская область,
Долгопрудный, Институтский переулок, д. 9, Россия*²*Институт физики твердого тела им. Осипяна РАН, Черноголовка, Московская область,
ул. Академика Осипяна, 2, 142432, Россия**burdanova.mg@mipt.ru***DOI: 10.26902/Graphene-23-098**

В данной работе показаны оптоэлектронные свойства атомарно тонких одномерных Ван-дер-Ваальсовых гетероструктур, состоящих из одностенных углеродных нанотрубок, покрытых изолирующими нанотрубками из BN и полупроводниковыми нанотрубками из MoS₂ (MoS₂@BN@CNT) [1]. Мы изучили равновесные свойства таких материалов (через оптическое поглощение, комбинационное рассеяние, фотолюминесценцию, ИК и терагерцовую спектроскопию), а также динамические свойства экситонов и свободных носителей зарядов (через оптическую накачку-оптический зондирование и оптическую накачку – терагерцовое зондирование). Данный материал обладает уникальной терагерцовой фотопроводимостью, которую динамически можно изменять от аномальной (положительная $\Delta T/T$, соответствующая отрицательной фотопроводимости) до нормальной (положительной фотопроводимости), обусловленной подвижными свободными зарядами в MoS₂ с подвижностью носителей зарядов, сравнимой с 2D MoS₂. Кроме того, показано наличие экситонов и их динамика в данной структуре при измерении методом накачки-зондирования. Таким образом, в нашей работе мы показываем сосуществование свободных носителей зарядов и экситонов в данной гетероструктуре [1].

[1] Burdanova M.G. et al. // Nano Lett. 2020. V. 20, № 5. P. 3560–3567.

Получение нанесенных углеродных катализаторов детонационным методом
Е.Ю. Герасимов^{1,3}, А.О. Кашкаров^{2,3}, Б.Л.Мороз¹, Д.А. Булушев¹, С.Ф. Голубь¹,
Э.Р.Пруээл^{2,3}

¹*Институт катализа СО РАН, пр. Ак. Лаврентьева 5, Новосибирск, Россия*

²*Институт гидродинамики СО РАН, пр. Ак. Лаврентьева 15, Новосибирск, Россия*

³*НГУ, ул. Пирогова 1, Новосибирск, Россия*

gerasimov@catalysis.ru

DOI: 10.26902/Graphene-23-099

Производство катализаторов – важнейшая отрасль промышленности, влияющая на развитие других отраслей промышленности, в частности, химической, нефтеперерабатывающей и т.д. Отдельную отрасль производства катализаторов составляют катализаторы на основе редких и благородных металлов, таких, как платина, палладий, родий, рений и т. д. При этом для более эффективного использования самого металла его наносят на носители – материалы, обладающие высокими значениями удельной поверхности и механической прочности. Наибольшее распространение получили оксидные (оксид алюминия, оксид кремния и т.д.) и углеродные носители. При этом углеродные носители обладают рядом преимуществ: углеродные носители устойчивы к действию кислотных и щелочных сред и влаги; катализаторы на углеродных носителях по каталитическим свойствам часто превосходят катализаторы на оксидных носителях, стоимость извлечения драгоценных металлов при утилизации отработанных катализаторов на углеродных носителях ниже.

Методами ПЭМВР и РФА было произведено исследование морфологии и структуры углеродных частиц катализаторов полученных в результате совместной детонации взрывчатых веществ с металлсодержащими прекурсорами. Методом ПЭМВР было показано, что в зависимости от вариации количества и состава прекурсоров меняется размер и форма частиц активного компонента, а также формы углеродного носителя. Наблюдаемые углеродные частицы имеют достаточно развитую поверхность для использования их в качестве носителей в процессах катализа.

Целью настоящей работы являлось изучение возможности получения нанесенных углеродных катализаторов (Ag, Pd, Au/C) в процессе совместной детонации взрывчатых веществ и солей соответствующих металлов, а также дальнейшее исследование полученных материалов в каталитических процессах.

Структура пленок малослойных графеновых частиц, полученных различными методами нанесенияЕ.А. Данилов¹, Т.С. Калякин^{1,2}, А.Б. Шахназарова¹¹АО «НИИГрафит», ул. Электродная, 2с1, Москва, Российская Федерация²РХТУ имени Д.И. Менделеева, Миусская пл, 9, Москва, Российская Федерация

danilovegor1@gmail.com

DOI: 10.26902/Graphene-23-100

Малослойные графеновые частицы широко исследуются в качестве материала для электроники, что связано как с возможностью технологичного и масштабируемого их получения методами прямой ультразвуковой или механической эксфолиации, так и с простотой адаптации различных распространенных методов получения пленок (варианты печати, аэрозольного нанесения, стержня Майера и др.) для формирования электропроводящих пленок на их основе. Основными областями применения таких пленок являются контактные дорожки и электродные изделия в составе различных электронных устройств, для чего требуется достижение высокого уровня электропроводности таких пленок. С этой точки зрения методы эксфолиации представляю несомненные преимущества по сравнению с методами, основанными на использовании стадии окисления графита, так как не приводят к получению продукта с высокой степенью дефектности, что негативно отражается на электропроводности пленок.

С другой стороны, в ряде работ показано, что перенос заряд в пленках и композиционных материалах на основе углеродных наночастиц определяется в первую очередь контактными явлениями, то есть создание условий для эффективного переноса на границах частиц. Во многом регулирование контактных сопротивлений возможно за счет выбора технологии и условий нанесения пленки.

В данной работе методами электронной микроскопии и рамановской спектроскопии для пленок малослойных графеновых частиц, полученных методом прямой ультразвуковой эксфолиации в водной среде в присутствии фторсодержащего поверхностно-активного вещества и в среде этиленгликоля, установлено влияние условий центрифугирования суспензий на выход и структуру малослойных графеновых частиц. Показано, что эксфолиация в обеих средах приводит к образованию преимущественно двух- и трехслойных частиц в фугатах, однако дефектность частиц заметно отличается при проведении эксфолиации в водной и органической среде.

Пленки получали методами drop-casting, аэрозольного напыления, Ленгмюра-Блоджетт и центробежного литья. Показано, что в выбранных экспериментальных условиях только техника Ленгмюра-Блоджетт позволяет получить прозрачные пленки с высоким уровнем электропроводности и равномерным распределением частиц по площади пленки, остальные методики преимущественно отличаются распределением частиц по площади капли.

Полученные результаты могут быть использованы при рациональном выборе технологии изготовления электропроводящих поверхностей на функциональных подложках электронных устройств.

Влияние графеновых покрытий на смачиваемость различных поверхностейВ.А. Андриющенко¹, И.А. Бетке¹, С.В. Комлина¹, Д.В. Смвж^{1,2}¹Новосибирский государственный университет, ул. Пирогова, 1, Новосибирск, Россия²Институт теплофизики СО РАН, пр. Лаврентьева, д. 1, Новосибирск, Россия

vladimir.andryushchenko@gmail.com

DOI: 10.26902/Graphene-23-101

Графен является перспективным материалов для широкого спектра приложений, связанных с модификацией физических и химических свойств различных поверхностей [1]. Графеновые покрытия могут эффективно применяться для защиты поверхностей от агрессивного воздействия внешней среды [2], а также могут быть использованы для изменения их лиофильности [3]. В настоящий момент в литературе апробирован ряд подходов для управления лиофильностью графеновых покрытий с помощью различных внешних воздействий, таких как облучение, приложение электрических полей, плазменная обработка и т.д. Не смотря на данное обстоятельство, вопрос о смачиваемости поверхностей с графеновым покрытием является предметом обширных дискуссий в научной литературе. Наиболее важными обсуждаемыми темами здесь являются прозрачность графенового слоя для смачивания поверхности, влияние свойств подложки, влияние внешней атмосферы, а также примесей на контактный угол графенового слоя, нанесенного на поверхность. При этом даже для самого простого случая графена на медной поверхности наблюдается существенный разброс экспериментальных данных по смачиваемости. Причина указанных расхождений может скрываться в комплексном воздействии внешней среды на параметры графена и подложки при манипуляциях, связанных с ростом и переносом графена. Для определения роли данных факторов необходим их независимый анализ, который осложнен наличием взаимосвязи, например, лиофильности и морфологии подложки с процессом нанесения и деформации графена.

При исследовании композитных материалов графен – подложка и анализе смачиваемости их смачиваемости, ключевым параметром является расстояние в системе подложка – графен, которое даже для меди может варьироваться в широком диапазоне, изменяя при этом прозрачность для смачивания от 0 до 100 процентов. Факторами, влияющими на формирование данного зазора, являются как морфология подложки, на которую наносится покрытие, так и структура графенового слоя, зависящая от подложки и условий роста.

В настоящей работе проводится исследование влияния графеновых покрытий на смачиваемость поверхностей на атомарно гладких кремниевых подложках с различной толщиной оксидного слоя, а также на модифицированных супергидрофильных и супергидрофобных кремниевых подложках имеющих одинаковую морфологию. Модификация кремниевых подложек проводилась методом лазерной абляции, приводящей к текстурированию поверхности с характерным масштабом структур 1–10 мкм. Параметры синтеза и переноса графена сохранялись идентичными для всех образцов, перенос графена осуществлялся через жидкую фазу, так как данный способ позволяет минимизировать повреждение и функционализацию графенового слоя. Проанализировано влияние гидрофильности и морфологии подложки на свойства итогового композита, его смачиваемость и дефектность нанесенного графена (обусловленную процессом переноса).

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда (проект № 23-29-00260)

[1] Zhao G. et al. //Chem. Soc. Rev. 2017. V. 46, № 15. P. 4417-4449.

[2] Chauhan D. S. et al. //Prog. Organ. Coatings. 2020. V. 147. P. 105741.

[3] Feng J., Guo Z. //Nanoscale Horizons. 2019. V. 4, №. 2. P. 339-364.

Формирование тонких пленок оксида графена на гибкой подложке в качестве платформы для биологических и химических сенсоров

И.А. Комаров, Е.А. Данилов

*АО «НИИГрафит», ул. Электродная, 2с1, Москва, Российская Федерация
master_kom@mail.ru***DOI: 10.26902/Graphene-23-102**

Одним из основных требований, предъявляемых к разрабатываемым новым химическим и биологическим сенсорам, является возможность интеграции в гибкие электронные устройства, в связи с чем к датчикам предъявляются требования по гибкости, касающиеся, в частности, адгезии и стойкости к изгибу и поверхностного функционального слоя (покрытия). Соответственно, возникает потребность в применении новых материалов, наиболее перспективными из которых являются углеродные наноматериалы (УНМ). При этом, учитывая, с одной стороны, невозможность непосредственного синтеза УНМ на полимерной подложке, а с другой – необходимость в выборе масштабируемого метода нанесения покрытия на подложку, были выбраны методы нанесения из дисперсии центрифугированием (метод центробежного литья) и аэрозольного нанесения.

В работе исследовались особенности формирования пленок оксида графена на полимерных подложках, в частности, исследовано влияние добавок дополнительных компонентов к коммерчески доступной водной суспензии оксида графена на значения краевых углов смачивания.

Показано, что использование добавки диметилацетамида уменьшает краевой угол смачивания относительно исходной водной суспензии на $5-7^\circ$ при времени высыхания значительно более 10 минут, что предпочтительно для нанесения методом центробежного литья. Применение смеси сложного состава, применяемой для регулирования свойств эмалевых красок позволяет уменьшить угол смачивания примерно на 5° при времени высыхания от 1 до 10^2 с, что предпочтительно для аэрозольного нанесения.

При применении обоих типов добавок формирование сплошной плёнки обеспечивается при концентрации оксида графена более 0.1 мг/мл что подтверждается как данными оптической, так и электронной микроскопии, и позволяет обеспечить образование сплошного слоя при минимальном времени нанесения.

Наибольшую временную стабильность показала дисперсия с добавлением диметилацетамида – признаков седиментации не наблюдалось в течение как минимум 180 суток, в случае использования растворителя для эмалевых красок образование агломератов наблюдалось после 60 суток.

Таким образом показано, что применение многокомпонентных дисперсий оксида графена позволяет регулировать краевой угол смачивания подложек без необходимости в применении механической и плазмохимической обработок, возможных не во всех случаях, что открывает дополнительные перспективы к формированию серийных биологических и химических сенсоров на основе трансдьюсера из углеродных наноматериалов.

Модифицирование фотокатодов Cu_2O восстановленным оксидом графена для фотокаталитического разложения воды

А.Н. Баранов¹, Зимбовский Д.С.^{1,2} Г.Н. Панин³

¹Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, химический факультет, Ленинские горы, стр. 3, Москва, Россия

²Московский Физико-Технический Институт, Долгопрудный, Московская область, 141701, Россия

³Институт проблем технологии микроэлектроники и особо чистых материалов РАН, Черноголовка, Россия

anb@inorg.chem.msu.ru

DOI: 10.26902/Graphene-23-103

В работе представлены результаты по модифицированию фотокатодов на основе оксида меди (I) путем нанесения на них оксида графена с различным составом и морфологией. Для нанесения оксида графена на поверхность катализатора предложена новая методика намораживания аэрозоля водной суспензии оксида графена с последующей сублимационной сушкой. Данный метод позволяет улучшить равномерность нанесения модифицирующего компонента по сравнению с традиционным методом напывания (drop-casting) и, в результате, улучшить функциональные свойства итогового материала. Установлено влияние состава и морфологии оксида графена на фотокаталитическую активность и стабильность работы фотокатодов на основе оксида меди (I). Нанесенные слои оксида графена способны выступать в качестве электроноакцепторного слоя, что в контакте со слоем оксида меди позволяет улучшить разделение зарядов, повысить плотность фототока и добиться лучшей стабильности работы фотокатодов в процессе фотокаталитического разложения воды.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РНФ (грант №23-49-00159).

Влияние механической и химической обработки на электромеханические свойства волокон из однослойных углеродных нанотрубок

А.И. Вершинина, О.Р. Гордая, М.В. Ломакин, М.С. Рыбаков, И.М. Чиркова
 ФГБОУ ВО "Кемеровский государственный университет",
 650000 ул. Красная, 6, г. Кемерово, Российская Федерация
 annaver89@mail.ru

DOI: 10.26902/Graphene-23-104

Материалы с различной чувствительностью электрического сопротивления к деформации могут быть использованы для создания тензорезистивных датчиков. Основной характеристикой материала является коэффициент тензочувствительности или GF (Gauge Factor) – отношение относительного изменения электрического сопротивления к деформации: $GF = (\Delta R/R_0)/\epsilon$. В работе были использованы сетки ОУНТ (с пропусканием 60% при 550 нм), полученные аэрозольным CVD-методом с длинами пучков ~ 20–40 мкм [1,2], диаметры нанотрубок ~ 1–2 нм. Из сеток ОУНТ формировались волокна методом «мокрого вытягивания» с использованием этанола и ацетона [3,4]. Длины волокон составляли 1 см. Часть волокон обрабатывались 10мМ водно-спиртовым раствором HAuCl_4 и часть подвергались механическому скручиванию (50–30 об/см). Таким образом, диаметры волокон ОУНТ варьировались от ~100–40 мкм. Установлено, что чувствительность сопротивления к деформации зависит от типа обработки. Таким образом максимальные значения GF составили 0.2 и 2 в диапазоне деформации до 4% для скрученного и допированного раствором HAuCl_4 волокон соответственно. При этом GF нескрученного и недопированного волокна составляет 14 при деформации 1% и снижается до 6.6 при деформации 15%. Высокое значение GF может использоваться для создания датчиков малых перемещений. Таким образом, электромеханические свойства волокон, полученных из сеток ОУНТ методом мокрого вытягивания, могут быть настроены для различных приложений в электронике.

Работа поддержана Министерством науки и высшего образования Российской Федерации (проект № FZSR-2020-0007 в рамках государственного задания № 075-03-2020-097/1).

- [1] Moisala A., Nasibulin A.G., Brown D.P. et al. // Chem. Eng. Sci. 2006. V.61. P. 4393-4402.
- [2] Moisala A., Nasibulin A.G., Shandakov S.D. et. al. // Carbon. 2005. V. 43. P. 2066-2074.
- [3] Zhilyaeva M.A., Shulga E.V., Shandakov S.D. et al. // Carbon. 2019. V. 150. P. 69-75.
- [4] Shandakov S.D., Kosobutsky A.V., Vershinina A.I. et al. // MSEB. 2021.V.269. P. 115178.

Исследование свойств гетероструктур графен/MoS₂

П.В. Винокуров, Е.П. Шарин, С.А. Смагулова

Северо-Восточный федеральный университет им. М.К. Аммосова, 677000,

ул. Белинского, 58, г. Якутск, Россия

pv.vinokurov@s-vfu.ru

DOI: 10.26902/Graphene-23-105

Вертикальная поэтапная укладка двухмерных материалов друг на друга дает возможность создания ван-дер-Ваальсовых гетероструктур, которые могут обладать новыми электронными и оптоэлектронными свойствами. В последнее время большой интерес представляют гетероструктуры графен/MoS₂.

В данной работе созданы гетероструктуры графен/MoS₂ путем последовательных переносов графеновых пленок и пленок MoS₂, синтезированных методом CVD. Сняты спектры комбинационного рассеяния света, спектры Q-DLTS для исследования глубоких уровней, проведены измерения вольт - амперных характеристик (ВАХ). Также на основе теории функционала рассчитана зонная структура гетероструктуры графен/MoS₂, которая показала, что из-за межслойного взаимодействия происходит изменение внутренней энергии атомов в слое графена, которое приводит к переносу электронов от слоя графена к слою MoS₂, т.е. к образованию р-п переходов на границе раздела. Измерения ВАХ гетероструктур графен/MoS₂ показали диодную характеристику. Методом Q-DLTS определены ряд глубоких уровней в полученных гетероструктурах. Показано что, гетероструктуры графен/MoS₂ обладают фоточувствительностью и перспективны для создания фотодетекторов и солнечных элементов на их основе.

Работа выполнена при финансовой поддержке Гос. задания в рамках научных проектов № FSRG-2023-0026 и № FSRG-2022-0011.

Сорбционные свойства малослойного графена в отношении долгоживущих радионуклидов

А.А. Возняковский¹, А.П. Возняковский², А.П. Карманов¹

¹ФТИ им. А.Ф. Иоффе, Политехническая 26, Санкт-Петербург, Россия

²ФГУП «НИИСК», Гапсальская 1, Санкт-Петербург, Россия

³ИБ Коми НЦ УрО РАН, Коммунистическая, 28, Сыктывкар, Россия

alexey_inform@mail.ru

DOI: 10.26902/Graphene-23-106

Представлены результаты исследования сорбционных свойств малослойного графена (количество слоев в пачке меньше 10) в виде порошка из циклических биополимеров в условиях самораспространяющегося высокотемпературного синтеза в отношении долгоживущих радионуклидов урана-238, тория-232, радия-226.

Было установлено, что синтезируемый малослойный графен позволяет эффективно очищать воду от радионуклидов (сорбция не менее 95%) без обратной десорбции даже при промывке слабым раствором кислот.

Изучение деформационного поведения металлов, модифицированных фуллереном, при помощи метода цифровой корреляции изображенийЕ.В. Гладких,¹ А.П. Федоткин,² А.С. Усеинов¹¹*Технологический институт сверхтвёрдых и новых углеродных материалов, 108840, г. Москва, г. Троицк, улица Центральная, дом 7а*²*Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет), 141701, Московская область, г. Долгопрудный, Институтский переулок, д.9, Россия
ekat.gladkih@yandex.ru***DOI: 10.26902/Graphene-23-107**

Изучение деформационного поведения композиционных материалов является трудоёмкой задачей, требующей разносторонних исследований [1]. Метод цифровой корреляции изображений широко используется в сочетании с испытаниями на растяжение объемных образцов [2]. Задачей данной работы было не только создать механическое напряжение, например, при помощи индентирования, но и получить высококачественные изображения тестируемого образца. Серия последовательных изображений, обработанная цифровым способом, была использована для получения новых данных о деформационных процессах в материале. Вдавливание алмазной пирамиды типа Виккерса проводилось при помощи твердомера НаноСкан-NV, схема испытаний соответствовала ГОСТ Р ИСО 6507-1-2007. Образцами для исследования стали: сплав алюминия, модифицированный фуллереном, а также сталь марки 40X2H2МА с графитовыми включениями. Для повышения контрастности изображения наблюдение велось в режиме тёмного поля. Для анализа полученных изображений отпечатков была написана программа, реализованная на языке Python [3]. Были рассчитаны зависимости остаточного перемещения точек индентированной поверхности относительно исходного изображения, составившие «тепловую карту» поля смещений. Выработанные рекомендации по обработке изображений позволили проводить исследования гетерогенных по структуре и внешнему виду материалов. Получаемые карты и зависимости остаточных деформаций от расстояния информативны в плане анализа доминирующих механизмов влияния локального механического давления на пластическую деформацию тестируемого материала. Профиль, проведенный через трещину, подтвердил предположение, сделанное по «тепловой карте»: за трещину деформация не распространилась – смещения практически равняются нулю; при этом скачок деформаций существенно превышает изменение в случае области с границами зерен. В ходе дальнейших работ планируется проверка возможности использования данного метода при определении полей деформаций во время проведения индентирования с помощью прозрачного индентора, как на этапе нагружения, так при разгрузке индентора.

[1] Baqersad J. et al. // Mech. Syst. Signal Process. 2017. V. 86. P. 17–34.

[2] Klimaszewski J. et al. // Image Proc. Commun. Challenges. 2013. V. 4. P. 153–162.

[3] Fedotkin A.P. et al. // Instrum. Exp. Tech. 2021. V. 64, № 3. P. 357–362.

**Selective extraction of small diameter single-walled carbon nanotubes
by aqueous solution of riboflavin**

A.E. Goldt, P. M. Kalachikova, A.G. Nasibulin

Skolkovo Institute of Science and Technology, Nobel 3, 121205, Moscow, Russia
a.goldt@skoltech.ru

DOI: 10.26902/Graphene-23-108

The unique physical and chemical properties of single-walled carbon nanotubes (SWCNTs) promise multiple high-end applications varying from biomedicine to photonics and electronics [1]. Most of the synthesized SWCNTs consist of highly bundled structures due to strong van der Waals interaction between tubes, which change and degrade their outstanding intrinsic properties. However, the majority of SWCNT applications need individual nanotubes metallic or semiconductive with required chirality.

We used a novel approach of one-step separation of SWCNTs using 2mM riboflavin aqueous solution. The mass ratio between SWCNT and dry riboflavin is 1:1. We found that riboflavin molecules can be selectively adsorbed on small-diameter semiconducting SWCNTs and allow their extraction from a polydisperse sample. This effect was demonstrated by preparing a series of SWCNT aqueous dispersions with different diameters using commercially available samples of TUBALL and CoMoCat SWCNTs and riboflavin.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ 22-13-00436.

[1] Dresselhaus M. S., Dresselhaus G., Eklund P. C., *Science of Fullerenes and Carbon Nanotubes: Their Properties and Applications*; Academic Press, Inc.: New York, 1996

Формирование микрокристаллов алмазов на поверхности углеродных нанотрубок методом плазмохимического осаждения из газовой фазы

Д.В. Городецкий, О.В. Седельникова, К.И. Баскакова, Е.В. Шляхова,
Л.Г. Булушева, А.В. Окотруб

*Институт неорганической химии им. А.В. Николаева СО РАН, г. Новосибирск
gorodetskiy@niic.nsc.ru*

DOI: 10.26902/Graphene-23-109

Синтез алмазов на поверхности углеродных нанотрубок (УНТ) интересен с точки зрения получения углеродного материала, обладающего сочетанием диэлектрических и оптических свойств алмаза с высокой электропроводностью УНТ. Взаимодействие sp^2 - и sp^3 -гибридизованного углерода, обладающего различными физико-химическими свойствами, такими как электро- и теплопроводность, механическая прочность, химическая инертность, делает материал привлекательным для разработки локальных люминесцентных источников света, теплоотводов для интегральных компонентов, стабильных автоэлектронных эмиттеров, радиационных сенсоров.

Наиболее распространенным методом синтеза углеродных наноматериалов является осаждение из газовой фазы (CVD-метод). В большинстве исследований в качестве подложек для роста алмазных пленок используют металлы (молибден, титан), а также кремний, кварц, керамики. В нашей работе мы проводим исследования синтеза алмазов на поверхности углеродных нанотрубок (рис.1).

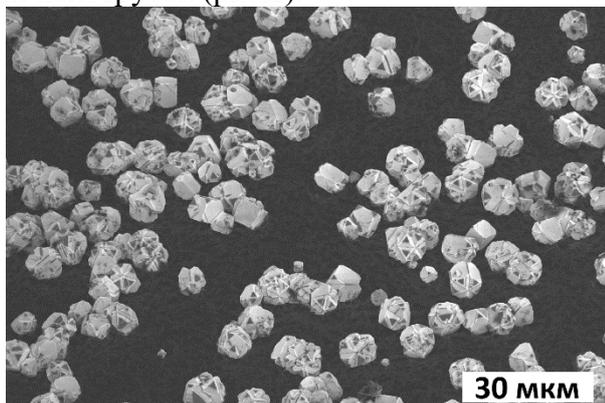


Рис. 1. Микрокристаллы алмазов на поверхности массива УНТ

Массивы многослойных УНТ были получены методом аэрозольного CVD на кремниевых подложках толщиной 0.4 мм и площадью $10 \times 10 \text{ мм}^2$ в проточном газофазном химическом реакторе при температуре синтеза 800 °С. Реакционной смесью являлся 2% раствор ферроцена в толуоле.

Синтез алмазных кристаллов проводился в микроволновом плазменном реакторе пониженного давления “Seki Technotron AX5250M”. Плазма генерировалась микроволновым излучением частотой 2.45 ГГц мощностью до 5 кВт. Рабочее давление в камере составляло ~ 110 мбар. Эффективность образования микрокристаллов алмаза на поверхности массивов УНТ изучалась в зависимости от мощности СВЧ-излучения и продолжительности синтеза. Размер микрокристаллов алмазов достигал 20 мкм при синтезе в течение 3 часов и мощности СВЧ излучения 3 кВт.

Для формирования периодического распределения алмаза проводилось лазерное профилирование поверхности массива УНТ. Для этого использовался твердотельный импульсный лазер с длиной волны 1064 нм и максимальной мощностью 20 Вт.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФ (грант № 22-72-10097, https://www.rscf.ru/prjcard_int?22-72-10097).

**Исследование механизма активационной проводимости
в боросодержащих углеродных наноструктурах типа ВС₃**

И.В. Запороцкова, С.В. Борознин, А.Р. Эль Занин, Н.П. Борознина, П.А. Запороцков
*Волгоградский государственный университет, 400062 г. Волгоград, пр. Университетский,
100, Волгоград, Россия
boroznin@volsu.ru*

DOI: 10.26902/Graphene-23-110

В настоящее время поиск новых элементов питания является актуальной задачей. Это связано с рядом недостатками современных материалов, в частности, литий-ионных аккумуляторов. Среди них наиболее существенными являются легкая воспламеняемость, горючесть и образование дендритных структур при многократном использовании. Поэтому современный исследовательский интерес обращен в сторону твердых материалов для батарей. В работе обсуждается возможность реализации активационной проводимости в графеноподобных слоях, содержащих примесные атомы бора. Выполнены квантово-химические исследования процесса миграции вакансии, отождествляемые с движением иона по поверхности нанослоя и определено влияние замещающих атомов В на изучаемое явление. Представлены результаты компьютерного моделирования перемещения дефекта по поверхности нанослоев, содержащих различное количество примесных атомов – от чистого графена до так называемого «борофена», то есть нанослоя, целиком состоящего из атомов бора. Установлено, что при увеличении примесных атомов бора происходит уменьшение высоты потенциального барьера, что делает реализацию активационной проводимости в боросодержащих нанослоях более эффективной, чем в чистых углеродных. Однозначно определена прямая зависимость между концентрацией примесных атомов бора в нанослое и высотой потенциального барьера. Результаты, излагаемые в данной статье, были получены с использованием модели молекулярного кластера и расчетного метода DFT с обменно-корреляционным функционалом B3LYP (валентно-расщепленный базисный набор 6-31G).

Работа выполнена в рамках государственного задания Министерства науки и высшего образования РФ (тема "FZUU-2023-0001").

**Управление типом и концентрацией азотных дефектов при выращивании
углеродных нанотрубок**

О.И. Ильин¹, Н.Н. Рудык¹, Д.Н. Хомленко¹, С.А. Хубежов², М.В. Ильина¹

¹Южный федеральный университет, ул. Шевченко, д.2, корп. Е, Таганрог, Россия

²Северо-Осетинский государственный университет имени К. Л. Хетагурова,

ул. Ватутина, д. 44-46, Владикавказ, Россия

oiiin@sfnedu.ru

DOI: 10.26902/Graphene-23-111

Углеродные нанотрубки, легированные азотом, (N-УНТ) имеют большой потенциал при создании автоэмиссионных устройств, газовых сенсоров, литий-ионных аккумуляторов, преобразователей и накопителей электрической энергии [1,2]. Различная концентрация и типы внедряемых азотных дефектов позволяют управлять свойствами N-УНТ, вплоть до проявления аномальных свойств [3], ранее не свойственных для данного материала. На сегодняшний день концентрации легирования азотом в однослойных УНТ ограничены ~ 1 ат.% [4], тогда как в многослойных УНТ средние концентрации могут достигать ~15-20 ат.% [5]. Однако данные методы легирования слабо применимы при создании электронных устройств с функциональными элементами на основе УНТ. Для приборного применения перспективным является метод плазмохимического осаждения из газовой фазы (PECVD), позволяющий легировать УНТ атомами азота непосредственно в процессе роста. При этом, изменение, одного из технологических параметров роста в методе PECVD оказывает влияние на геометрические и физические свойства получаемых УНТ.

В данной работе проводилось исследование влияния температуры на геометрические параметры, концентрацию легирующей примеси азота и тип формирующихся дефектов при выращивании N-УНТ в атмосфере аммиака и ацетилен. Установлено, что N-УНТ с наибольшей концентрацией легирующей примеси азота и высоким аспектным отношением нанотрубок (полученные при температуре 525 °С) обладают лучшими пьезоэлектрическими и резистивными свойствами.

Исследование выполнено за счет гранта РФФИ № 22-79-10163, в ЮФУ.

- [1] P. Ayala et. al // Carbon. 2010. V.48, №3. P. 575-586.
- [2] M. Il'ina et. al // Carbon. 2022. V.190. P. 348-358.
- [3] M. Il'ina et. al // Journal of Materials Chemistry C. 2021. 9. P. 6014-6021.
- [4] M Glerup et. al // Chemical Physics Letters. 2004. V.387. P. 193-197.
- [5] M Glerup et. al // Chemical Communications. 2003. P. 2542-2543.

Прототип тактильного датчика в составе углеродных нанотрубок и биологического наноматериала

Л.П. Ичкитидзе^{1,2}, Н.А. Никитина¹, А.Г. Марков², А.Ю. Герасименко^{1,2}, Д.В. Тельшев^{1,2},
С.В. Селищев¹

¹Научно исследовательский университет МИЭТ, Зеленоград, Москва, Россия

²Первый Московский государственный медицинский университет

имени И.М. Сеченова, Москва, Россия

ichkitidze@bms.zone

DOI: 10.26902/Graphene-23-112

Исследовался прототип резистивного пленочного тактильного датчика, содержащего матрицу бычьего сывороточного (БСА, биологический материал) и наполнитель из многостенных углеродных нанотрубок (МУНТ), т.е. исследовался пленочный биологический наноматериал БСА/МУНТ как датчик деформации изгиба.

БСА/МУНТ содержал БСА и МУНТ типа «Таунит МД». Методами УЗ и магнитного перемешивания готовились водные дисперсии состава 20 масс.% БСА и 0.5 масс.% МУНТ. Водную дисперсию наносили на гибкую подложку из полиэтилена (ПЭТ, толщина $d_0 \sim 30-50$ мкм). ПЭТ-подложка имела массу ~ 10 мг, а нанесенные на нее пленки имели размеры $200-2000$ нм \times 5 мм \times 20 мм. Пленка БСА/МУНТ служила тензочувствительным элементом (ТЧЭ). Определялись угол изгиба θ ТЧЭ, его сопротивление R и количество изгиба, а также число цикла измерения. При отсутствии деформации $\theta=0^\circ$ и $R=R_0 \sim 10-800$ кОм. Получена максимальная тензочувствительность $(1/R_0)dR/d\theta \sim 1\%/град$.

В диапазоне нагрузки $5-60$ мг регистрировалось минимальное давление до 6 Па. Рассмотренный прототип тактильного датчика может быть основой для медицинских устройств (высокочувствительная пальпация, эндоскопия и др.).

Работа выполнена в рамках госзадания №075-03-2023-024, а в части получения биологического наноматериала – в рамках соглашения №075-15-2021-596.

Формирование муаровых структур в графене с помощью сканирующей зондовой литографии

А.И. Комонов, В.А. Селезнев, В.Я. Принц

*Институт физики полупроводников им. Ржанова, Россия**komonov@isp.nsc.ru***DOI: 10.26902/Graphene-23-113**

Графен благодаря своим уникальным свойствам является перспективным материалом для наноэлектроники. Отсутствие запрещённой зоны не позволяет формировать приборы на основе графеновых структур классическими методами. Одним из способов искусственного создания запрещённой зоны в графене является формирование муаровых структур. Известно, что при разориентации двух слоёв графена на небольшой угол происходит перераспределение электронной плотности за счёт взаимодействия электронов π -орбиталей верхнего и нижнего слоя [1]. В результате наблюдаются муаровые структуры и в графене открывается запрещённая зона. Контролируя угол разориентации графеновых слоёв, можно формировать 2D-плёнки с заданными свойствами [2].

В данной работе представлен оригинальный способ формирования муаровой структуры с помощью сканирующей зондовой литографии. Зонд атомно-силового микроскопа в контактном режиме прижимался с заданной силой к поверхности подложки Si/SiO₂, рядом с краем графеновой плёнки. Перемещение зонда в заданном направлении приводило к механическому отрыву локального участка графена и формированию биграфена. С помощью сканирующего туннельного микроскопа исследовалась полученная структура. Было обнаружено образование муаровых структур, которые связаны с перераспределением электронной плотности на поверхности биграфена. Период постоянной решётки сверхструктуры составил ≈ 9 нм, что в 36 раз больше периода атомарной решётки графена. Угол разориентации в данной структуре составил 1.5°. Показана возможность формирования структур с заданной разориентацией слоёв, что перспективно для формирования устройств твистроники [3].

Работа выполнена при финансовой поддержке министерства образования и науки, грант FWGW-2022-0009.

[1] Bistritzer R., MacDonald A.H. // Proc. Natl Acad. Sci. USA. 2011. V. 108. P. 12233-12237.

[2] Cao Y., Fatemi V., Fang S. et al. // Nature. 2018. V. 556. P. 43-50.

[3] Feuerbacher M. // Acta Crystallogr A Found Adv. 2021. V. 77. P. 460-471.

Контролируемая анодно-окисная нанолитография графена
А.И. Комонов, В.А. Селезнев, Р.А. Соотс, И.В. Антонова, В.Я. Принц
Институт физики полупроводников им. Ржанова, Россия
komonov@isp.nsc.ru

DOI: 10.26902/Graphene-23-114

Сканирующая зондовая микроскопия является классической методикой диагностики графена и других 2D-материалов. Так же широко развиты методы сканирующей зондовой литографии тонких плёнок. Известно, что при приложении смещения между зондом атомно-силового микроскопа и плёнкой графена во влажной среде происходит его окисление. В зависимости от условий процесса он может окисляться частично, формируя оксид графена в области воздействия, либо полностью до оксида углерода, оставляя наноямки [1]. Создаваемые таким образом низкоразмерные графеновые наноструктуры рассматриваются для использования в перспективных приборах и устройствах, однако механизмы, протекающие при окислении графена до конца не изучены. Сканирующая зондовая микроскопия позволяет картировать различные свойства поверхности графена с разрешением 10 нм [2]. Это позволяет детализировать процессы, протекающие при наноструктурировании, на качественно новом уровне.

В данной работе с помощью анодно-окисной нанолитографии зондом атомно-силового микроскопа были сформированы наноструктуры на графене и тонких плёнках графита. В процессе формирования происходил прямой контроль качества и характеристик создаваемых структур. Были сформированы наноленты из графена и оксида графена шириной менее 20 нм, а также нанонити из оксида графена шириной менее 20 нм. Методом отображения сопротивления растекания показано значительное возрастание сопротивления при переходе графена в оксид графена. Методом электростатической силовой микроскопии показана локализация заряда в образованных высокоомных структурах. Метод локального зондового окисления перспективен для прецизионного формирования гибридных наноструктур графен-оксид графена с заданными свойствами.

Работа выполнена при финансовой поддержке министерства образования и науки, грант FWGW-2022-0009.

[1] Weng L., Zhang L., Chen Y.P. et al. // Appl. Phys. Lett. 2008. V. 93. P. 093107.

[2] Connolly M.R., Smith C.G. // Phil. Trans. R. Soc. 2010. V. 368. P. 5379–5389.

Устойчивость капель ван-дер-Ваальса к нагреву

В.Н. Кондратьев

Лаборатория Теоретической Физики имени Н.Н.Боголюбова, ОИЯИ, 141980,

Дубна, Россия

vkondrat1401@mail.ru

DOI: 10.26902/Graphene-23-115

Динамика нагретых систем ван-дер-Ваальса конечных размеров (капель) исследуются в рамках подхода классической молекулярной динамики. Показано, что при увеличении начальной энергии возбуждения поведение системы изменяется от жидкого к парообразному. При промежуточных температурах капли проявляют критическое поведение при мульти-фрагментации. Это поведение оставляет свои сигналы в инклюзивных распределениях по массам и условных моментах образованных фрагментов. Связь между наблюдаемым критическим поведением и фазовым переходом жидкость – газ второго рода исследуется с использованием капельной модели Фишера для средних распределений фрагментов по массе и выполнения анализа Кампи для корреляционных и флуктуационных свойств распределений фрагментов. Обсуждается зависимость сигналов критического поведения от размера капли. Резкое изменение стабильности капель при температурах, соответствующих критической изоэнтропе, показано на основе анализа размеров наибольшего осколка.

Свойства графена в гетероструктурах с нитридом бора

И.И. Кондрашов¹, М.Г. Рыбин¹, Е.Д. Образцова^{1,2}

¹*Институт общей физики им. А.М. Прохорова Российской академии наук,
ул. Вавилова, 38, Москва, Россия*

²*Московский физико-технический институт, Институтский пер., 9,
Долгопрудный, Россия
navi.soul@gmail.com*

DOI: 10.26902/Graphene-23-116

Исследования графена в тонкопленочных гетероструктурах в последние годы ведутся очень активно. Такие структуры обладают огромным потенциалом для применения в электронике, сенсорах, солнечных батареях и многом другом благодаря сочетанию уникальных электрических и оптических свойств каждого материала. Среди них гетероструктуры графен/BN демонстрируют высокую фоточувствительность и хорошие контактные свойства, обеспечивающие эффективную инжекцию и перенос заряда. Метод CVD-синтеза отлично подходит для получения пленок для таких гетероструктур.

В нашей работе мы использовали самодельную камеру с холодными стенками для синтеза пленок графена и нитрида бора с помощью резистивного CVD-метода на медной фольге. Используя метод "мокрого" переноса, мы сформировали из полученных пленок графен/BN гетероструктуры на кремниевых и кварцевых подложках, а затем провели оптические и электрофизические исследования. Исходные пленки графена и нитрида бора сначала отдельно исследовались с помощью спектроскопии комбинационного рассеяния света, оптического поглощения света и XPS-спектроскопии для оценки структуры и однородности поверхности. В готовых графен/BN структурах исследовалась подвижность носителей заряда в зависимости от конфигурации слоев и условий окружающей среды.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант №21-72-10164) и Президентской программы для молодых ученых (СП-5712.2021.3).

Сверхтонкие мембраны на основе однослойных углеродных нанотрубок в качестве высокоэффективных фильтров специальных аэрозолей

Д.В. Красников¹, Х.А.Б. Рамирез¹, В.В. Губарев^{2,3}, Н.И. Рагинов¹, И.В. Новиков¹, В.А. Кондрашов¹, М.С. Кривокорытов³, В.В. Медведев^{2,3}, Ю.Г. Гладуш¹, А.Г. Насибулин¹

¹Сколковский институт науки и технологий, г. Москва, Россия

²Московский физико-технический институт, г. Долгопрудный, Россия

³Институт спектроскопии РАН, г. Троицк, Россия

d.krasnikov@skoltech.ru

DOI: 10.26902/Graphene-23-117

Несмотря на то, что основной прогресс в области создания высокоэффективных аэрозольных фильтров пришелся на середину XX века, внедрение новых стандартов в области медицины, транспорта и производства не только обеспечивает общий стабильный рост рынка аэрозольной защиты, но и приводит к созданию новых для классических подходов решений. В настоящей работе изучается возможность использования сверхтонких свободностоящих мембран на основе однослойных углеродных нанотрубок в качестве высокоэффективных фильтров специальных аэрозолей. В частности, показана эффективность использования свободностоящих мембран нанотрубок для защиты от частиц, эмитируемых источником экстремального ультрафиолета – ключевого элемента следующего поколения литографов. Более того мы предлагаем простой, экономичный и энергоэффективный процесс регенерации мембран – высокотемпературную обработку мембраны, достижимую резистивным нагревом в вакууме. Используя модельные наночастицы аэрозоля Sn (материал источника ультрафиолета), мы демонстрируем предлагаемый способ очистки мембраны с энергопотреблением всего 20 Вт/см². Применимость подхода подтверждена в ходе экспериментов на полупромышленном источнике экстремального ультрафиолета. Показано, что резистивный нагрев восстанавливает коэффициент пропускания пленки и, как следствие, характеристики всего источника [1].

Работа поддержана Советом по грантам президента РФ (грант № МК-3000.2022.1.3).

[1] Ramirez J.A., Krasnikov D.V., Gubarev V.V. et al. // Carbon. 2022. V. 198, № 15. P. 364-370.

Эластопроводимость германеновых нанолент с точечными дефектами замещения

А.С. Чибриков, О.С. Лебедева, Н.Г. Лебедев

ФГАОУ ВО «Волгоградский государственный университет», 400062, проспект

Университетский 100, Волгоград, Россия

lebedeva_os@volsu.ru

DOI: 10.26902/Graphene-23-118

Предсказанный в 2009 г. и успешно синтезированный в 2014 г. двумерный аналог графена – германен – является одним из самых перспективных наноматериалов «постграфеновой эры» [1]. Ширина запрещенной зоны германена составляет в соответствии с теоретическими исследованиями величину $E_g \sim 24$ мэВ. Исследования показывают, что запрещенная щель германена и его электронные свойства чувствительны к внешним полям, механическим деформациям и химической адсорбции.

В работе представлены результаты теоретического исследования пьезорезистивных свойств германеновых нанолент (GeNR), содержащих изопорфные (атомы Si и Sn) донорные (атомы P, As, Sb) и акцепторные (атомы Al, Ga, In) точечные дефекты замещения. Моделирование электронного строения деформированных нанолент основано на геометрическом преобразовании элементарной ячейки GeNR и соответственно зоны Бриллюэна в рамках метода сильной связи, подробно описанном в работе [2].

Сравнение результатов расчёта продольной компоненты тензора эластопроводимости $M(\delta)$ как функции относительной деформации показало аналогичное поведение зависимости для одного типа дефектов при малых концентрациях. Увеличение концентрации примесей ведёт к росту компоненты M для нанолент n -типа по сравнению с p -типа.

Исследование выполнено за счет средств гранта Российского научного фонда № 22-22-20048 (<https://rscf.ru/project/22-22-20048/>) и за счет средств бюджета Волгоградской области.

[1] Acun A., Zhang L., Vampoulis P. et al. // J. Phys.: Condens. Matter. 2015. V. 27. P. 443002.

[2] Lebedeva O.S., Lebedev N.G., LyapkosoVA I.A // J. Phys.: Condens. Matter. 2020. V. 32. № 14. P. 145301.

Влияние процессов химической модификации на сорбционные свойства мезопористого углеродного материала

Л.М. Левченко

ИНХ СО РАН. Новосибирск, Россия

luda@niic.nsc.ru

DOI: 10.26902/Graphene-23-119

Среди углеродных материалов особое значение имеют мезопористые углеродные материалы, занимающие важное место среди множества высокодисперсных и пористых систем, используемых в качестве адсорбентов. Их отличительными особенностями являются: возможность варьирования удельной поверхности в диапазоне 100–1000 м²/г и эффективного размера пор от ангстрем до сотен микрон, изменение гранулометрического состава от 0.5–0.7 мм до 1.6–3.2 мм, механическая прочность, высокая адсорбционная способность.

В настоящей работе в качестве объекта исследования использовали – синтетический композиционный углерод-углеродный материал марки «Техносорб» (УМ), полученный нанесением пиролитического углерода на частицы сажи с последующей активацией и имеющий турбостратическую структуру. УМ имел следующие характеристики: фракция 0.5–0.7 мм, удельная поверхность 360 м²/г, ρ – 2.02 г/см³, примеси Fe – 0.125–0.15 вес.% ; Al – 0.025–0.035 вес.% ; Si – 0.005 вес.% ; K – 0.06–0.075 вес.% ; Ca – 0.125–0.15 вес.% по данным АЭС. Было показано, что УМ является преимущественно мезопористым материалом. Объем мезопор достигает 0.2–0.3 см³/г. Структура пор существенно влияет на характер адсорбции.

Были изучены процессы химического модифицирования (окисление, введение комплексообразователей, галогенидов), которые существенно влияют на адсорбционные свойства углеродных материалов. Проведение процессов окисления (HNO₃, H₂O₂, O₃) позволяет создать различное количество кислородсодержащих (карбокисильных, гидроксильных и лактонных) групп на углеродной поверхности, с увеличением которых растет адсорбционная способность и получить сорбенты НУМС-О извлекающие примеси тяжелых металлов из растворов.

Показано, что селективность сорбентов определяется процессами химического модифицирования. Физико-химические свойства и сорбционные характеристики НУМС-О существенно меняются при введении относительно небольших (2–10%) количеств иода, хлора, триметиламина, октиланилина, гидролизированных соединений сурьмы.

При модифицировании НУМС-О йодом (из растворов либо газовой фазы) были получены сорбенты НУМС-И, которые селективно извлекают ртуть (Hg²⁺, Hg⁰) из газовых и жидких сред. Сорбенты НУМС-ТОА, НУМС-ОА извлекают из растворов Au³⁺, Pt⁴⁺, Pt²⁺, Pd²⁺ (модифицирование НУМС-О триактиламином и октиланилином); НУМС-ГК селективно извлекает Cd²⁺, Cu²⁺ из растворов (модифицирование гуминовыми кислотами); НУМС-Sb селективно извлекает Na⁺, Ca²⁺, Cs⁺, Sr²⁺, Rb⁺ из растворов (модифицирование гидролизированными соединениями сурьмы).

В статических и динамических изучены процессы и механизм сорбции Hg²⁺, Hg⁰, Pb²⁺, Cd²⁺, Ni²⁺, Cu²⁺, Na⁺, Ca²⁺, Cs⁺, Sr²⁺, Au³⁺, Pt⁴⁺, Pt²⁺, Pd²⁺ из растворов на окисленных углеродных сорбентах.

Создание модифицированных мезопористых сорбентов на основе углерода селективных по заданному компоненту может иметь широкое применение в областях химической промышленности для очистки воздуха, сточных вод, технологических растворов, получения особо чистых солей, в экологической области для извлечения токсических примесей из воздуха и стоков.

**Исследование процессов нековалентной функционализации
полиуглеродмонофторида в органических средах**

В.Г. Макотченко, И.П. Асанов, Т. Ю. Подлипская, И.В. Корольков, А.И. Булавченко
ФГБУН Институт неорганической химии им. А.В. Николаева, г. Новосибирск, Россия,
mwg@niic.nsc.ru

DOI: 10.26902/Graphene-23-120

Исследованы процессы нековалентной функционализации (ультразвукового диспергирования) полиуглеродмонофторида на основе графита и малослойного графена (МСГ) в диметилсульфоксиде, ацетоне, 2-пропаноле, диметилформамиде и н-метилпирролидоне.

Полимоноуглеродфторид на основе графита в диметилсульфоксиде, ацетоне и 2-пропаноле устойчивых дисперсий не образовывал даже после 15 часов обработки ультразвуком. В диметилформамиде и н-метилпирролидоне по мере увеличения времени диспергирования полимоноуглеродфторид сначала становился серым, а потом черным. Причем с увеличением времени диспергирования дисперсии в этих средах становились все более устойчивыми и при черном окрашивании дисперсии были устойчивыми в течении более месяца. Полимоноуглеродфторид на основе МСГ во всех изученных жидких средах при обработке ультразвуком в течение 1, 3 и 15 часов образовывал устойчивые в течение более 6 месяцев дисперсии. Однако если в диметилсульфоксиде, ацетоне и 2-пропаноле даже после 15 часов цвет дисперсий был белым, то при обработке ультразвуком полимоноуглеродфторида на основе НСГ в диметилформамиде и н-метилпирролидон в течение одного часа дисперсии были серого цвета, а после 3-х часов – черного.

Установлено, что чем выше диэлектрической проницаемость среды, тем больше эффективность диспергирования полимоноуглеродфторида на основе МСГ. В среде н-метилпирролидона происходит восстановление концевых атомов фтора с образованием концевых атомов углерода, а в среде диметилформамида происходит образование аминофторида на основе графита и МСГ. Причем с увеличением времени диспергирования растет zeta potential системы и растут латеральные размеры аминофторида, что обусловлено, вероятно, их агрегацией.

Работа поддержана Министерством науки и высшего образования Российской Федерации, проект № 121031700321-3, № 121031700314-5, № 121031700313-8, № 121031700315-2.

Сравнительное исследование противомикробной активности наноструктурированных углеродных материалов, импрегнированных серебром
Е.Н. Москвитина^{1,2}, В.Л. Кузнецов², С.И. Мосеенков², А.Н. Серкова², А.В. Заворин²

¹СИБФНКЦ ФМБА России, Томск, Россия

²Институт катализа им. Г.К.Борескова, Новосибирск, Россия

ecoli@rambler.ru

DOI: 10.26902/Graphene-23-121

Развитие устойчивости бактериальных и грибковых инфекционных возбудителей к традиционным противомикробным препаратам представляет серьезную мировую проблему. В связи с этим поиск и разработка новых альтернативных антимикробных наноматериалов на основе углерода с широким спектром действия представляются актуальными для разработки альтернативных подходов для борьбы с вредными микроорганизмами.

В данной работе мы исследовали наличие антимикробных свойств у наноструктурированных углеродных материалов (НУМ), импрегнированных серебром (Ag/НУМ), и сравнили вызванные ими эффекты на типичных распространенных патогенах *Escherichia coli*, *Staphylococcus aureus*, *Candida albicans*. В исследовании использован набор НУМ, произведенных в России, в состав которого вошли тщательно охарактеризованные многослойные углеродные нанотрубки (МУНТ), каталитические углеродные нановолокна с различной ориентацией графеновых блоков (коаксиально-конической и стопочной, КВУ1 и КВУ2) и ультрадисперсные детонационные наноалмазы (УДА). Данные НУМ были импрегнированы серебром в концентрациях 0,5, 1 и 5 вес. %. Средний размер частиц серебра составлял примерно 13 нм. В качестве биологических объектов для изучения противомикробных свойств был использованы стандартные эталонные штаммы Американской коллекции типовых культур *E. coli* ATCC 25922, *S. aureus* ATCC 25923, *C. albicans* ATCC 10231. В работе использованы методы световой и люминесцентной микроскопии (Nicon eclips E200 и Carl Zeiss Axiostar). Кроме этого взаимодействие микроорганизмов с НУМ исследовано с использованием растровой электронной микроскопии (РЭМ) на микроскопе JSM-6460LV.

Для оценки действия Ag/НУМ бактерии и грибы суспендировали в дистиллированной воде, доводя до мутности, соответствующей 0,5 МакФарланда (1.5×10^8 кое/мл для бактерий и $1 \sim 5 \times 10^6$ кое/мл для грибов). Затем полученные суспензии с микроорганизмами добавляли к Ag/НУМ, предварительно суспендированных в воде в разных концентрациях. Через сутки инкубирования в темноте при 35 °С (при перемешивании в качалке) производили посев 0,20 мкл суспензий на питательные среды. Еще через 24–48ч подсчитывали количество колоний. Все исследованные НУМ, импрегнированных серебром, проявляли заметную антибактериальную и противогрибковую активность, зависящую от времени воздействия и концентрации Ag/НУМ. Определена минимальная бактерицидная концентрация (МБК) Ag/НУМ. Наиболее эффективными Ag/НУМ с минимальной бактерицидной концентрацией 50 мкг/мл оказались 5% Ag/УДА, 5% Ag/КВУ1, и 5% Ag/КВУ2. Минимальная бактерицидная концентрация для 5% Ag/МУНТ составила 200 мкг/мл для *E.coli* и 300 мкг/мл для *S.aureus*. Наибольшей противогрибковой активностью также обладали 5% Ag/УДА, 5% Ag/КВУ1, и 5% Ag/КВУ2 с МБК 300 мкг/мл. Было также показано, что НУМ и серебро обладают синергизмом, усиливая эффекты друг друга. При увеличении процентного содержания серебра в НУМ снижалась минимальная бактерицидная/фунгицидная концентрация композитного материала. Полученные данные будут использованы для разработки новых материалов в биомедицине.

Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ 22-25-00715.

Термодесорбционное изучение физико-химических взаимодействий водорода с углеродными наноструктурами в связи с проблемами чистой энергетикиЮ.С. Нечаев¹, Н.А. Шурыгина¹, Е.А. Денисов², А.О. Черетаева³¹ФГУП «ЦНИИчермет им. И.П. Бардина», г. Москва, РФ²Санкт-Петербургский государственный университет, г. Санкт-Петербург, РФ³Тольяттинский государственный университет, г. Тольятти, РФ

yuri1939@inbox.ru

DOI: 10.26902/Graphene-23-122

На основе использования разработанной методологии и результатов анализа термодесорбционных спектров (ТДС) водорода в углеродных материалах и наноматериалах [1-4] изучены экстраординарные данные ([5] и др.) по «супер» хранению «обратимого» (атомное отношение (H/C) ≤ 4) и «необратимого» ((H/C) ≈ 1) водорода в графитовых нановолокнах (ГНВ). Рассмотрена физика процессов десорбции водорода из ГНВ [5], в т.ч. эффект Курдюмова и спилловер эффект [2, 3]. Показана возможность воспроизведения результатов [5], но только при раскрытии «ноу-хау» активирования ГНВ, приводящего к появлению определенного ТДС пика.

[1] Nechaev Yu.S., Alexandrova N.M., Cheretaeva A.O. et al. // Int. J. Hydrogen Energy. 2020. V. 45, P. 25030-25042.

[2] Нечаев Ю.С., Денисов Е.А., Черетаева А.О. и др. // Кинетика и катализ. 2022. Т. 63, № 4. С. 526-539.

[3] Nechaev Yu.S., Denisov E.A., Cheretaeva A.O. et al. // Fuller. Nanotub. Carbon Nanostructures. 2022. V. 30, № 1. P. 211-219.

[4] Nechaev Yu.S., Makotchenko V.G., Shavelkina M.B. et al. // Open J. Energy Efficiency. 2017. V. 6. P. 73-79.

[5] Park C, Anderson P.E., Chambers A. et al. // J. Phys. Chem. B. 1999. V. 103. P. 10572-10581.

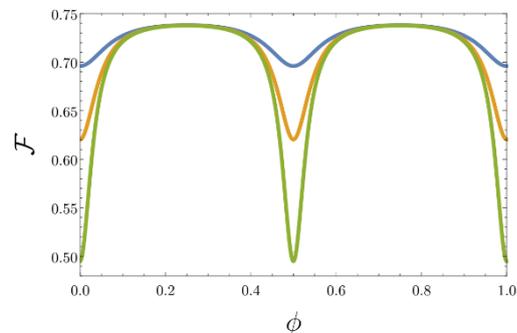
Интерференция в факторе Фано двумерного топологического изолятораР.А. Ниязов^{1,2}, Д.Н. Аристов^{1,2}, В.Ю. Качоровский²¹НИЦ КИ - ПИЯФ, 188300, Орлова роща, 1, Гатчина²ФТИ им. А.Ф. Иоффе, 194021, Политехническая ул., 26, Санкт-Петербург

niyazov_ra@npi.nrcki.ru

DOI: 10.26902/Graphene-23-123

В исследовании было изучено поведение фактора Фано [1] в 2D топологических изоляторах в режиме квантового спинового эффекта Холла. Топологические изоляторы с металлическими контактами представляют собой квантовые интерферометры, так как имеют проводящие электронные состояния на краю. Это геликоидальные состояния – электроны с разным спином распространяются в противоположные стороны. В таких системах интерференционные вклады в кондактанс появляются, только при наличии магнитной примеси на краю [2].

В работе теоретически изучалась зависимость фактора Фано от магнитного потока (см. Рис.). Эта величина связана с флуктуацией тока из-за дискретности электрона. Показано, что даже без магнитной примеси (зеленая кривая на Рис.) существуют антирезонансы при полуцелых значениях магнитного потока. Таким образом, интерференционные эффекты вносят больший вклад в фактор Фано, чем в кондактанс. На основе этого явления возможно создание высокочувствительных детекторов магнитного поля.



Работа выполнена при финансовой поддержке гранта Президента Российской Федерации (проект № МК-2918.2022.1.2) (Р.А.Н.) и РФФИ (грант № 20-12-00147) (Д.Н.А., В.Ю.К.).

[1] Nazarov Y.V., Blanter Y.M., Quantum Transport. Cambridge University Press. 2009.

[2] Niyazov R.A., Aristov D.N., Kachorovskii V.Y. // JETP Lett. 2021. V. 113, P. 689-700.

Термическая стабильность и оптические свойства интеркалированных соединений фторированных графитов с ацетонитрилом и 2-бутанолом

D.V. Pinakov¹, G.N. Chekhova¹, Yu.V. Shubin¹, V.I. Sysoev¹, I.V. Yushina¹, V.D. Tikhova²,
A.V. Okotrub¹, L.G. Bulusheva¹

¹ИИХ СО РАН им. А.В. Николаева, Новосибирск, Российская Федерация

²НИОХ СО РАН им. Н.Н. Ворожцова, Новосибирск, Российская Федерация

pinakov@niic.nsc.ru

DOI: 10.26902/Graphene-23-124

Фторированные графиты $(C_2F_x)_n$ способны обратимо интеркалировать различные молекулы между слоями, а структура и свойства интеркалированных соединений фторированных графитов зависят от содержания фтора в матрице и от вида внедрённого компонента. В данной работе проводится сравнение термостабильности и оптических свойств $(C_2F_x)_n$ с $x = 0.92$ и 0.87 , интеркалированного ацетонитрилом и 2-бутанолом. Расчёты теории функционала плотности проводятся параллельно с экспериментальными исследованиями. Показано, что 2-бутанол сильнее взаимодействует с частично фторированными слоями графена из-за большей длины и гибкости молекулы, а также из-за наличия кислорода карбонильной группы. Согласно тем же расчётам, молекулы обоих внедрённых компонентов (ацетонитрила и 2-бутанола) предпочитают располагаться над sp^2 -гибридизованными графитоподобными участками и вблизи их границ со фторированными фрагментами. По данным рентгеноструктурного анализа, соединения с 2-бутанолом имеют большее расстояние между слоями фторированного графита, чем аналогичные соединения с ацетонитрилом, чем можно объяснить более слабое поглощение соединений $(C_2F_x)_n$ с 2-бутанолом в видимом диапазоне от 600 до 800 нм. В то же время соединения с 2-бутанолом имеют более плотную упаковку молекул и фторграфитовой матрицы, что подтверждается значительно более высокой температурой разложения данных соединений по результатам ДТА. Различное взаимодействие матриц фторированного графита и молекул внедрённых компонентов («гость» – «хозяин») вызывает изменение электронного возбуждения и фотолюминесценции интеркалированных соединений фторированного графита.

Углеродные материалы в качестве эффективного инструмента для конструирования нанесенных Pd-CeO₂ структур активных в низкотемпературном окислении СО

О.Ю. Подъячева¹, А.Н. Коробова¹, Л.С. Кибис¹, Е.М. Славинская¹, О.А. Стонкус¹,
Т.Ю. Кардаш¹, А.В. Задесенец², С.В. Коренев², А.И. Боронин¹

¹Институт катализа СО РАН, проспект Ак. Лаврентьева, 5, Новосибирск, Россия

²Институт неорганической химии СО РАН, проспект Ак. Лаврентьева, 5,

Новосибирск, Россия

pod@catalysis.ru

DOI: 10.26902/Graphene-23-125

Работа посвящена исследованию возможности использования углеродных материалов (УНМ) в качестве эффективного инструмента для конструирования нанесенных Pd-CeO₂ структур активных в реакции низкотемпературного сухого и влажного окисления СО. Были использованы мезопористые УНМ, такие как МУНТ, окисленные МУНТ, N-УНТ, УНВ, N-УНВ и Сибунит. С помощью методов РФЭС и рамановской спектроскопии описаны сходства и различия УНМ в отношении поверхностных свойств и дефектности структуры. Методами РФА и ПЭМ показано одновременное формирование на углеродной поверхности вне зависимости от типа УНМ одинакового набора структур различной конфигурации и размерности: одиночных атомов Pd и Ce, субнаноразмерных кластеров PdO_x и CeO_x, а также наночастиц PdO и CeO₂. Преобладание определенной структуры определяется содержанием палладия и соотношением Pd/Ce в катализаторе. Обнаружена близкая высокая активность этих структур в условиях сухого окисления и сохранение высокой активности в условиях влажного окисления только для катализатора с преобладанием наночастиц палладия, находящихся в тесном контакте с наночастицами CeO₂, с размером наночастиц индивидуальных компонентов от 1 до 8 нм.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ (грант № 21-13-00094).

Ограничение сверхскользкости: влияние релаксации структуры и наличия атомных дефектов на примере повернутых слоев графена

А.М. Попов¹, А.С. Минкин², И.В. Лебедева³, А.А. Книжник⁴, С.А. Вырко⁵,
Н.А. Поклонский⁵, Ю.Е. Лозовик¹

¹*Институт спектроскопии Российской академии наук, Физическая ул. 5,
Троицк, Москва, Россия*

²*Институт прикладной математики им М.В.Келдыша Российской академии наук,
Миусская пл. 4, Москва, Россия*

³*CIC nanoGUNE BRTA, San Sebastián 20018, Spain*

⁴*ООО "Кинтех Лаб", 3-я Хорошевская ул. 12, Москва, Россия*

⁵*Белорусский государственный университет, пр-т Независимости 4, Минск, Беларусь
popov-isap@mail.ru*

DOI: 10.26902/Graphene-23-126

Явление структурной сверхскользкости [1] (сверхнизкого трения между твердыми поверхностями) важно для понимания атомистических механизмов трения. Несмотря на ряд исследований структурной сверхскользкости, см. обзор [2], мало внимания было уделено рассмотрению возможных причин ограничения макроскопической сверхскользкости. В данной работе поверхность потенциальной энергии (ППЭ), то есть зависимость энергии взаимодействия между слоями от координат, описывающих их относительное смещение, рассчитана с использованием классического потенциала и метода функционала плотности для набора соизмеримых структур муара идеального бислоя графена и в случае наличия вакансий в одном из слоев, соответственно. Обнаружено что для всех рассмотренных идеальных структур муара ППЭ, которая определяется симметрией системы, может быть аппроксимирована первой гармоникой разложения Фурье с точностью в пределах 1 %, подтверждая универсальное правило для сонаправленных слоев 2D-материалов [3]. Учет релаксации структуры слоев, а также наличие вакансий приводят к увеличению амплитуды неровностей ППЭ и, следовательно, статического трения на порядки величины. Таким образом, атомные дефекты и релаксация структуры могут быть причиной ограничения сверхскользкости.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ (грант № 23-42-10010, <https://rscf.ru/project/23-42-10010/>) и БРФФИ (грант № Ф23РФФ-049).

[1] Hirano M., Shinjo K. // Phys. Rev. B 1990. V. 41, № 17 P. 11837-11851.

[2] Hod O., Meyer E., Zheng Q. et al // Nature. 2018. V. 563, № 7732. P. 485-492.

[3] Lebedev A.V., Lebedeva I.V., Popov A.M., et al // Phys. Rev. B 2020. V. 102, № 4. P. 045418.

Композиционные материалы из термически обработанных аэрогелей на основе смеси оксида графита и МУНТ для суперконденсаторов

К.М. Попов, В.И. Сысоев, В.Е. Архипов, А.В. Окотруб
*Институт неорганической химии им. А.В. Николаева СО РАН,
просп. Акад. Лаврентьева, 3, Новосибирск, 630090
popov@niic.nsc.ru*

DOI: 10.26902/Graphene-23-127

В работе представлено исследование структуры и свойств композиционных материалов без связующего вещества на основе смеси оксида графита и функционализированных углеродных нанотрубок для электродов суперконденсаторов. В качестве основы композита использовали термически обработанный оксид графита (ТОГ). Многослойные углеродные нанотрубки (МУНТ) могут выступать как наполнитель, улучшающий электропроводность композита и создающий более развитую иерархическую структуру.

С целью увеличения смачивания водой МУНТ были обработаны в смеси кислот H_2SO_4/HNO_3 . Для приготовления композиционных материалов использовали лиофильную сушку суспензий смеси оксида графита и функционализированных МУНТ. Полученный аэрогель прессовали и термически обрабатывали в атмосфере Ar до 400 или 800 °С для удаления кислородсодержащих функциональных групп.

Электрохимические свойства композитов ТОГ/МУНТ были исследованы в водных растворах электролитов (6М КОН, 1М H_2SO_4 , 1М Na_2SO_4). Показано влияние температуры обработки и соотношения компонент в композите ТОГ/МУНТ на электрохимические свойства композитных электродов. Показано, что содержание функционализированных МУНТ около 5 вес.% относительно исходного оксида графита оказало положительный эффект на увеличение электрохимической ёмкости композитов при сравнении с ТОГ (полученных при температуре обработки 400 °С в Ar) в 1М водном растворе H_2SO_4 в ~ 2 раза при 1000 мВ/с (до ~ 15 Ф/г) и в ~1.3 раза для скорости развёртки 2 мВ/с (до ~ 128 Ф/г).

Графитизация алмаза в результате отжига под слоем железа

О.В. Седельникова, Д.В. Городецкий, А.Д. Федоренко, М.А. Гребенкина, А.Н. Лавров,
Л.Г. Булушева, А.В. Окотруб

*Институт неорганической химии им А.В. Николаева СО РАН, проспект Академика
Лаврентьева, 3, Новосибирск, Россия*

o.sedelnikova@gmail.com

DOI: 10.26902/Graphene-23-128

Алмаз и графен - это материалы, состоящие только из атомов углерода. Их кристаллические решетки имеют хорошее соответствие размеров (расхождение параметров проекции решетки алмаза (111) и графита не превышает 2%). Такой фактор может позволить создать новый гибридный материал с более низким контактным сопротивлением на границе алмаз-графен, по сравнению с традиционно используемыми системами полупроводник-металл. Графитизация поверхности алмаза происходит при температуре около 1200 °С, напыление тонкого слоя карбидообразующего металла позволяет значительно понизить температуру формирования графитовых слоев [1,2]. В данной работе методами рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии (РФЭС), рентгеновской спектроскопии поглощения (NEXAFS) и спектроскопии комбинационного рассеяния света (КРС) проведено исследование трансформации поверхности алмаза под слоем железа в условиях высокотемпературного отжига. Формирование графитового углерода на поверхности монокристаллического алмаза и поликристаллической алмазной пленки установлено при температуре около 600 °С. Из данных угловой зависимости NEXAFS C K-спектров был сделан вывод о перпендикулярной ориентации графитовых слоев относительно поверхности отожженного алмаза со слоем железа.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФ (грант № 22-72-10097, https://www.rscf.ru/prjcard_int?22-72-10097).

[1] Okotrub A.V., Gorodetskiy D.V., Palyanov Yu.N. et al. //J. Phys. Chem. C. 2023. V. 127, № 7, P. 3563-3569.

[2] Okotrub A.V., Sedelnikova O.V., Gorodetskiy D.V. et al. //Materials. 2023. V. 16, № 4. P. 1650.

Модификация оксида графена для применения в функциональных материалах
Д.Ю. Столярова¹, В.В. Ломовкин^{1,2}, П.А. Вовкотруб^{1,2}, М.К. Рабчинский³, С.Н. Чвалун¹
¹Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт», Москва, Россия
²Московский физико-технический институт (НИУ), Долгопрудный, Россия
³Физико-технический институт имени А.Ф. Иоффе РАН, Санкт-Петербург, Россия
stolyarova.d@gmail.com

DOI: 10.26902/Graphene-23-129

Поиск новых наполнителей, обеспечивающих высокий уровень эксплуатационных показателей электрореологических сред, сенсорных элементов датчиков и чипов, биотопливных ячеек, а также электропроводящих наполнителей композитов, является важной прикладной задачей современного материаловедения. Оксид графена (ОГ) – двумерный кристалл углерода, с кислородсодержащими группами, которые обуславливают его уникальные физико-химические свойства, является перспективным функциональным наполнителем для создания различных «умных» материалов с широкими возможностями применения.

Данная работа посвящена комплексному исследованию и модификации ОГ с целью регулируемого управления его физическими и химическими свойствами для последующего получения функциональных материалов на основе производных ОГ. Предложены различные методы модификации, ковалентная модификация ОГ низкомолекулярным хитозаном для получения высокоэффективного наполнителя электрореологических сред, а также модификация ОГ путём мягкой термической обработки, для управления реологическим поведением его водных суспензий в технологиях изготовления аэрогелей и аэрозольного нанесения аналитических покрытий чипов различных тест-систем.

В исследовании использован комплексный подход, сочетающий методы анализа электрофизических, оптических и структурных особенностей двумерных частиц и ими наполненных композитов, который позволяет получить полное представление о процессах влияющих на формирование тех или иных свойств конечных «умных» материалов.

Работа выполнена при финансовой поддержке Госзадания НИЦ «Курчатовский институт».

Нековалентное легирование двустенных углеродных нанотрубок**А.А. Тонких^{1,2}, Н.Р. Арутюнян¹, Д.В. Рыбковский^{3,1}, Е.Д. Образцова^{1,2}**¹*Институт общей физики им. А.М. Прохорова Российской академии наук, ул. Вавилова, д. 38, 119991 Москва, Россия*²*Московский физико-технический институт (Национальный исследовательский университет), 141701 Долгопрудный, Московская область, Россия*³*Сколковский институт науки и технологий, Большой бульвар д.30, стр.1, 121205, Москва, Россия**aatonkikh@gmail.com***DOI: 10.26902/Graphene-23-130**

В данной работе мы представляем экспериментальные результаты по нековалентному легированию двустенных углеродных нанотрубок (ДУНТ), сформированных в проводящие электроды.

В качестве изучаемого объекта использовались уникальные электроды с высоким содержанием ДУНТ. Для этого в лаборатории синтезировались ДУНТ из одностенных углеродных нанотрубок (ОУНТ) большого диаметра (средний диаметр 1,6 нм, TUBALL). Применяемый метод синтеза позволяет получать образцы ДУНТ с узким распределением диаметров внутренних нанотрубок (0.9 нм).

Основной целью работы является исследование эффективности переноса электрического заряда при нековалентном легировании внутренних или внешних стенок ДУНТ. Для этого проведена серия экспериментов по заполнению нанотрубок сильными акцепторами (йод, хлорид меди) для реализации нековалентного легирования внутренних нанотрубок. Также в данной работе представлены экспериментальные результаты по легированию внешних нанотрубок осаждением хлорида железа из газовой или раствора. Более детальное изучение легирования ДУНТ реализовано электрохимическими методами с *in-situ* наблюдением переноса заряда методами спектроскопией комбинационного рассеяния света. Уникальность образцов позволила провести сравнительный анализ легирования для ОУНТ и ДУНТ, синтезированных на их основе.

Актуальность работы обусловлена перспективами применения таких объектов в качестве электродов в сенсорных и аккумуляторных технологиях.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 22-22-00554, <https://rscf.ru/project/22-22-00554/>.

Взаимодействие щелочных металлов с пористыми углеродными материалами

Ю.В. Федосеева, Е.В. Шляхова, А.А. Ворфоломеева, А.А. Коцун, М.А. Гребёнкина,
К.М. Попов, Л.Г. Булушева, А.А. Окотруб

*Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт неорганической химии им. А.В. Николаева Сибирского отделения Российской академии наук,
пр. Академика Лаврентьева, 3, Новосибирск, 630090, Россия
fedoseeva@niic.nsc.ru*

DOI: 10.26902/Graphene-23-131

Развитая поверхность, структурные несовершенства, примеси гетероатомов в углеродных материалах оказывают положительное влияние на их электрохимические характеристики в литий-ионных и натрий-ионных аккумуляторах (ЛИА и НИА) и конденсаторах из-за адсорбционного механизма накопления ионов поверхностями материалов. В данной работе были получены пористые азотсодержащие углеродные материалы методом химического осаждения из газовой фазы из ацетонитрила при температурах 650–800 °С. В качестве темплатных наночастиц использовались продукты термолитического разложения тритрата кальция. Характеризация полученных образцов осуществлялась методами электронной микроскопии, низкотемпературной адсорбции/десорбции азота, спектроскопии комбинационного рассеяния света, инфракрасной спектроскопии, рентгеновской фотоэлектронной спектроскопией и ближнего края рентгеновского поглощения (РФЭС и NEXAFS). Полученные образцы были испытаны в ЛИА и НИА, и некоторые из них протестированы в литий-ионных конденсаторах. Наибольшие значения емкости 489–1158 мАч/г в ЛИА и 120–182 мАч/г в НИА при плотностях тока 1.0–0.05 А/г показал материал, синтезированный из тритрата кальция при температуре 650 °С. Эксперименты NEXAFS *in situ* и квантово-химические расчеты показали, что щелочные металлы прочно связываются с вакансионными дефектами и азотсодержащими функциональными группами, что объясняет крайне высокую необратимую емкость пористых углеродных электродов на первых циклах и широкий диапазон потенциалов, при которых происходит дальнейшее накопление щелочных металлов. Полученные результаты проливают свет на роль дефектов при хранении лития и натрия в пористых углеродных материалах.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ (грант № 19-73-10068).

Создание эталона черного тела на основе УНТ

О.В. Шаповалова, А.Р. Иштеев

ФИЦ ХФ РАН, ул. Косыгина д.4, Москва, Россия

shapovalova@chph.ras.ru

DOI: 10.26902/Graphene-23-132

Углеродные наноматериалы задают новые тенденции к созданию черных поверхностей. Эти новые разновидности поглотителей обладают низкой поглощающей способностью в широком диапазоне длин волн и при различных углах падения.

Углеродные нанотрубки (УНТ) – это тип наноструктур, обладающих уникальными механическими [1,2], электрическими и оптическими [3] свойствами. Вертикально ориентированные углеродные нанотрубки (ВОУНТ) зарекомендовали себя как материал с низким отражением в видимом и инфракрасном диапазонах.

В работе представлено исследование оптических свойств ВОУНТ, обладающих отражением менее 0.1% в видимой и инфракрасной областях спектра в широком диапазоне углов падения и отражение света (Рис. 1). Данные получены на спектрофотометре Agilent Cary 5000 с приставкой UMA. Материал обладает низким коэффициентом отражения во всем диапазоне измерения (500–2500 нм).

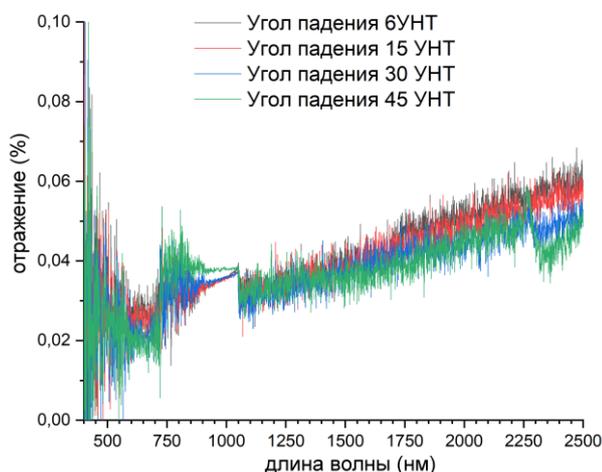


Рисунок 1 – спектр отражения УНТ при углах 6, 15, 30 и 45 градусов.

Толщина углеродного слоя составляет 185 мкм и формируется методом химического осаждения из газовой фазы (ХОГФ) на каталитической подложке. Плотность массива ВОУНТ позволяет образовывать самоорганизующееся полотно из массива углеродных нитей за счет ван-дер-ваальсовых связей.

В работе предлагается использовать данный материал при создании эталона черного тела для расширения возможностей применения государственного первичного эталона единиц спектральных коэффициентов направленного пропускания, диффузного и зеркального отражений в диапазоне длин волн от 0.2 до 20.0 мкм (ГЭТ 156-2015) и калибровки оптических приборов.

[1] Salvétat J.-P., Bonard J.-M., Thomson N.H. et al. // Appl. Phys. A. 1999. V. 69. P. 255–260.

[2] Yakobson B.I., Avouris P. // Top. Appl. Phys. 2001. V. 80. P. 287.

[3] Martinez P.M. et al. // ACS Appl. Mater. Interfaces. 2019. V. 11, № 35. P. 32235-32243.

Пористый азотсодержащий углерод, полученный из кальциевой соли дикарбоновых кислот, и его электрохимическая активность в суперконденсаторе

Е.В. Шляхова, А.Д. Нищаклова, М.А. Гребенкина, А.В. Окотруб, Ю.В. Федосеева

*Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт неорганической химии им. А.В. Николаева Сибирского отделения Российской академии наук, проспект**Академика Лаврентьева 3, Новосибирск 630090, Россия**shlyakhovaev@niic.sbras.ru***DOI: 10.26902/Graphene-23-133**

Устройства для хранения электрической энергии необходимы для повседневной жизни. Основным путем для улучшения плотности энергии суперконденсатора является увеличения удельной емкости или увеличения напряжения окна за счет характеристик электродного материала. В качестве предшественников темплатных частиц для приготовления образцов пористого азотсодержащего углерода были использованы кальциевые соли тартаровой, глутаровой и адипиновой кислот, и CH_3CN – в качестве источника углерода. Показано, что состав и морфология темплатных частиц и температура синтеза оказывают определяющее влияние на толщину и дефектность углеродных слоев и текстурные характеристики углеродных материалов. Их тестирование в суперконденсаторах показало, что образцы обладают удовлетворительными электродными характеристикам (емкость до 170 Ф/г в 1 М H_2SO_4 и до 130 Ф/г в 6 М КОН электролитах) и являются достаточно устойчивыми в области стабильности электролитов.

Работа была выполнена при финансовой поддержке РФФ (грант № 19-73-10068).

Квантово-химическое исследование влияния допирования дисульфида молибдена (MoS₂) атомами N и Nb на электрохимические свойства

В.А. Алексеев, Л.Г. Булушева

*ИНХ СО РАН, 630090, Проспект Академика Лаврентьева д.3, г. Новосибирск, Россия
valexev01@gmail.com***DOI: 10.26902/Graphene-23-134**

Монослой дисульфида молибдена (MoS₂) является перспективным анодным материалом благодаря своей высокой емкости и механической стабильности. Тем не менее, низкая электропроводность и плохая обратимость реакции конверсии требует модификации чистого MoS₂, простейшей из которых является допирование. Так, ковалентное встраивание атомов N и Nb увеличивает проводимость MoS₂ [1], создавая при этом дополнительные высокоэнергетические места для адсорбции атомов Li.

Данная работа посвящена исследованию свойств N- и Nb-допированного MoS₂ для электрохимических приложений. Работа ведется методом квантово-химического расчета с помощью пакета программ Quantum ESPRESSO [2], использующая базис плоских волн и теорию функционала плотности для исследования электронных свойств твердых тел.

В работе уделяется внимание модификации электронной структуры при введении гетероатомов N и Nb: оба электронодефицитных гетероатома приводят к p-типу допирования, однако концентрация примесных состояний различна для N и Nb.

Изучается взаимодействие атомов Li с монослоем MoS₂, ключевое для электрохимических процессов. Включение N, Nb приводит к увеличению энергии связи Li с MoS₂. В случае допирования N, близость адсорбции Li к N увеличивает энергию связи по сравнению с другими положениями на монослое. При допировании атомами Nb энергия связи распределена по всем положениям в монослое с меньшим разбросом по энергии связи. При больших концентрациях примесного азота, MoS₂ начинает разлагаться при меньших концентрациях лития по сравнению с чистым MoS₂.

Работа поддержана Российским научным фондом, грант № 23-73-00048.

[1] Liu Q. et al. // Nanotechnology. 2016. V. 27, № 17. P. 175402.

[2] <https://www.quantum-espresso.org/>

Синтез, структура и свойства производных графена, модифицированных биополимерными соединениям

Г.А. Антонов¹, М.С. Степанова², О.А. Соломаха², Н.А. Беседина³, С.А. Рыжков¹,
С.Д. Савельев¹, М.В. Байдакова¹, Д.Ю. Столярова⁴, Д.А. Кириленко¹, С.И. Павлов¹,
М. Бржежинская⁵, М. К. Рабчинский¹

¹Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе, Санкт-Петербург, Россия

²Институт Высокмолекулярных Соединений Российской Академии Наук,
В. О. Большой пр. д.31, Санкт-Петербург, Россия

³Академический университет им. Ж.И. Алфёрова, ул. Хлопина, д. 8, корп. 3, Санкт-Петербург, Россия

⁴НИЦ "Курчатовский институт", пл. Академика Курчатова, д. 1, Москва, Россия

⁵Helmholtz-Zentrum Berlin für Materialien und Energie, Hahn-Meitner-Platz 1,
Берлин, Германия

Antonov@mail.ioffe.ru

DOI: 10.26902/Graphene-23-135

Интенсивные исследования последнего десятилетия показали, что химически модифицированные производные графена (ХМГ) перспективны в области создания новых биоразлагаемых и биосовместимых композитов, а также хеморезистивных биосенсорных платформ для диагностики инфекционных заболеваний [1,2]. В данной работе нами продемонстрированы результаты применения для этих задачи аминированного графена (АГ) – ХМГ, представляющей собой слой графена, базальная плоскость и края которого ковалентно модифицированы аминными группами.

Так, показано, что АГ может быть модифицирован олигомерами глутаминовой кислоты с средней длиной в 4–8 мономерных звеньев и эффективностью модификации 14–17%. Установлено, что выполненная модификация приводит к более равномерному распределению материала в полимерной матрице композитов на основе поликапролактона (ПКЛ) по сравнению с исходным АГ. Использование композита позволило избежать резкого ухудшения механических свойств при достижении содержания наполнителя в полимерной матрице ПКЛ больше 1 вес.%. Кроме того, модификация увеличила биосовместимость с остеобластными клетками человека (клеточная линия MG-63)

Была разработана методика иммобилизации моноклональных антител мыши к IgG человека и к IgM человека на аминированном графене с эффективностью иммобилизации ~ 55-62%. В процессе решения данной задачи была разработана математическая модель для оценки эффективности ковалентной модификации графеновых структур биомолекулами и олигомерами. Продемонстрировано влияние иммобилизуемых антител на электронную структуру производных графена, в частности структуру валентной зоны и величину запрещенной зоны. На основе полученных покрытий разработаны и успешно протестированы прототипы биосенсорных платформ. Установлено, что предел чувствительности разработанных тест-систем составляет 10–50 пкг/мл с величиной хеморезистивного отклика на уровне 1.9–3.4% и времени отклика 5-6 минут.

Работа выполнена в рамках выполнения Государственного задания № FFUG-2022-0010.

[1] Nath P., Kabir M. A., Doust S. K. et al. // Infectious Disease Reports. 2021. V. 13. №. 4. P. 518-539.

[2] Muniandy S., Lai C. W., Pulingam T., Leo B. F. // Nanohybrids: Future Mater. Biomed. Appl. 2021. V. 87. P. 69-102.

[3] Prasad, S., Suresh, S., Wong, R // Materials. 2018. V.11, №8. P. 1430.

Синтез углеродных нановолокон и исследование их модифицирующей способности в составе смазочных материалов

С.Д. Афонникова¹, Г.Е. Селютин², И.В. Мишаков¹, А.А. Попов³, А.А. Ведягин¹,
Ю.В. Шубин³

¹Институт катализа СО РАН, проспект Ак. Лаврентьева 5, Новосибирск, Россия

²Институт химии и химической технологии СО РАН, Академгородок 50, Красноярск,
Россия

³Институт неорганической химии СО РАН, проспект Ак. Лаврентьева 3, Новосибирск,
Россия

sonya.afonnikova@yandex.ru

DOI: 10.26902/Graphene-23-136

Использование углеродных наноматериалов (графены, нанотрубки (УНТ) и нановолокна (УНВ)) в качестве модифицирующих добавок в различные композиты представляется очень перспективным. Например, добавление УНМ в состав смазочных материалов приводит к улучшению их трибологических свойств: уменьшению коэффициента трения и снижению пятна контакта [1,2]. В настоящей работе предложен способ синтеза УНВ в режиме углеродной эрозии массивных сплавов никеля Ni-M, не содержащих в своём составе оксидных носителей [3]. В качестве источника углерода для синтеза УНВ была использована смесь предельных углеводородов C₂-C₄.

В работе были изучены морфологические и структурные свойства полученных образцов УНВ. Исследовано влияние режима предварительной кислотной обработки, применяемой с целью удаления частиц катализатора и функционализации поверхности, на характеристики углеродного наноматериала и его седиментационную устойчивость в суспензии с маслом. Проведены сравнительные триботехнические испытания индустриального и синтетического моторного масла, модифицированного добавкой УНВ. Установлена оптимальная концентрация углеродной добавки в составе масла. Продемонстрирована перспектива использования УНВ в качестве антифрикционной добавки, способствующей снижению температуры разогрева масла и предотвращению износа трущихся деталей.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ (грант № 21-13-00414).

[1] Peng Y., Hu Y., Wang H. //Tribol. Lett. 2006. V. 25, № 3. P. 247-253.

[2] Rahman M.M. et al. //Lubricants. 2022. V. 10, №. 11. P. 281.

[3] Afonnikova S.D. et. al. //Topics Catal. 2023. V. 66. P. 393-404.

Влияние влажности на проводимость азот-модифицированных одностенных углеродных нанотрубокЮ.А. Ахмадулина^{1,2}, В.И. Сысоев¹, Л.Г. Булушева¹, А.В. Окотруб¹¹*Институт неорганической химии им. А.В. Николаева СО РАН, просп. Ак. Лаврентьева, 3, Новосибирск, Россия*²*Новосибирский государственный технический университет, просп. Карла Маркса, 20, Новосибирск, Россия**yulia.akhmadulina@yandex.ru***DOI: 10.26902/Graphene-23-137**

В настоящее время актуальными вопросами являются мониторинг загрязнения окружающей среды, контроль качества воздуха, а также контроль процессов в промышленности. Существует необходимость создания чувствительных газовых датчиков, способных регистрировать малые концентрации газов, обладая при этом стабильными эксплуатационными характеристиками и малыми габаритами. Одним из вариантов такого рода датчиков являются резистивные газовые сенсоры на основе углеродных нанотрубок (УНТ). Одностенные УНТ (ОУНТ) в форме тонких пленок используются в качестве датчика влажности. Изменение проводимости пленок ОУНТ в ответ на изменение влажности может быть вызвано допированием/поляризацией нанотрубки при адсорбции молекул воды или модификации контактов между нанотрубками. Относительный вклад этих факторов в изменение сопротивления пленки и их зависимость от относительного давления воды могут различаться в зависимости от толщины пленки и функционального состава.

В данной работе представлена химическая процедура для ковалентной функционализации ОУНТ азотсодержащими группами для применения в газовых сенсорах. Была использована двухступенчатая функционализация ОУНТ, которая включает в себя фторирование с последующим замещением фтор-групп на аминогруппы посредством отжига фторированных УНТ в атмосфере аммиака при 200, 400 и 600 °С. Проведено тестирование пленок исходных и ковалентно модифицированных ОУНТ на изменение влажности среды. Все материалы работают при комнатной температуре и имеют хорошую стабильность. Пленки немодифицированных ОУНТ показывают относительный отклик на воздействие насыщенных паров воды равный 7%. Модификация фтор-содержащими группами увеличивает отклик на влажность в 3 раза, а азот-содержащими группами – до 2 раз. Кроме того, в результате химической модификации происходит изменение характера кривой отклика и регенерации. Результаты исследований указывают на хорошие перспективы модифицированных углеродных нанотрубок для создания датчиков влажности.

Исследование фотолюминесценции в Ван-дер-Ваальсовых гетероструктурах, модифицированных фемтосекундным лазером

Л.А. Барсуков, Н.П. Некрасов, И.И. Бобринецкий
НИУ «МИЭТ», пл. Шокина, 1, Москва, Зеленоград, Россия
leonty.barsukov@gmail.com

DOI: 10.26902/Graphene-23-138

Ван-дер-Ваальсовы гетероструктуры на основе двумерных материалов представляют большой интерес для исследований за счёт своих уникальных свойств. На основе таких структур с чередующимися слоями создают высокопроизводительные устройства электроники, не уступающие трёхмерным аналогам. Обработка лазером сверхкоротких импульсов позволяет значительно расширить возможности по созданию 2D гетероструктур с заданными свойствами посредством их функционализации и контролируемого внесения дефектов [1].

В данной работе исследовали гетероструктуры графен/MoS₂, полученные при жидкостном переносе CVD выращенного графена на кристаллы дисульфида молибдена, включая модифицированные 800 нм фемтосекундным лазером. При обработке лазером варьировали дозу облучения посредством изменения мощности излучения и скорости сканирования лазерным пучком. Качество полученных структур оценивалось измерением толщины слоёв и целостности поверхности на атомно-силовом микроскопе Solver-Pro, а также по соотношению пиков 2D/G, их положению на спектрах комбинационного рассеяния света и изменению фотолюминесценции (ФЛ).

Графен формирует с MoS₂ фоточувствительный гетерокontakt [2], перенос энергии на котором обуславливает изменение оптических свойств структуры. Анализ спектров показал увеличение ФЛ для покрытого графеном MoS₂ по сравнению с чистым как для модифицированных, так и не модифицированных гетероструктур. Возбуждение светом длиной волны 532 нм может приводить к увеличению энергии экситонов в структуре. Было обнаружено, что обработка лазером приводит к значительному изменению свойств – для модифицированного MoS₂ с графеном ФЛ оказалась значительно ниже, чем у не модифицированного, однако выше, чем у непокрытого графеном. Данные отличия можно объяснить пониженной генерацией экситонов в структурах, функционализированных лазером.

На основе рассмотренных структур возможно создание недорогих устройств, обладающих выдающимися электрофизическими параметрами, в частности, высокочувствительных оптических биосенсоров.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант № 19-19-00401-П).

[1] Zuo P. et al. //Nanoscale. 2019. Т. 11, № 2. P. 485-494.

[2] Lin W., Zhuang P., Chou H et al. //App. Phys. Lett. 2019. V. 114, № 11. P. 113103.

Оксиды диамана. Алмазоподобные пленки со смешанным покрытием.

Л.А. Варламова, С.В. Ерохин, К.В. Ларионов, П.Б. Сорокин

НИТУ МИСИС, Ленинский пр-т, д. 4, стр. 1, Москва, 119049, Россия

pbsorokin@misys.ru

DOI: 10.26902/Graphene-23-168

Диаманты являются квазидвумерной пленкой, состоящей из двух атомарных слоев углерода с структурой подобной алмазу. Их выдающиеся электронные и механические свойства делают их одним из перспективных современных наноразмерных материалов.

Для синтеза двумерных алмазоподобных пленок непосредственно из биграфена требуются высокие температуры и давлений, однако использование прекурсоров в процессе синтеза сильно снижает необходимые энергетические затраты. Такой процесс называют химически индуцированным фазовым переходом, он протекает за счет изменения поверхностной энергии двумерных углеродных структур путем сорбции на биграфен небольших функциональных групп, из-за чего атомы углерода переходят из sp^2 в sp^3 гибридное состояние и электронная структура графеновых листов разрушается, в результате чего образуются углеродные связи между листами биграфена, образуя алмазоподобную пленку. Способ связывания листов биграфена и, как следствие, геометрия полученной пленки – со структурой кубического или гексагонального алмаза – зависят от первоначальной ориентации листов друг относительно друга и схемы осаждения пассивирующих групп на поверхность.

В данной работе мы изучили структуру и электронные свойства алмазоподобных пленок, функционализированных гидроксильными и пероксидными группами, а также атомами водорода [1].

Мы рассмотрели осаждение гидроксильных и пероксидных групп, а также атомов водорода на биграфен упаковки AA', и осаждение гидроксидов и атомов водорода на биграфен упаковки AB. В работе показано, что осаждение кислорода в эпоксидной форме не дает необходимого вклада в изменение поверхностной энергии и поэтому дальнейшего связывания не происходит. В работе исследована зависимость стабильности таких пленок от температуры и давления и показано, что алмазные пленки, покрытые смесью водорода и гидроксильных групп стабильны при низких температурах и давлении порядка 35 ГПа, что хорошо согласуется с имеющимися экспериментальными данными [2]. Так же изучены электронные свойства таких алмазных пленок и показано, каким образом они изменяются при изменении стехиометрии покрытий.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ № 21-12-00399.

[1] Varlamova, L. A.; Erohin, S. V.; Larionov, K. V.; Sorokin, P. B. // J. Phys. Chem. Lett. 2022, V. 13, № 49, 11383–11390

[2] Barboza, A. P. M., Guimaraes, M. H. D., et al. // Adv. Mater. 2011, V. 23, №27, 3014–3017

Высокоэффективная «умная» жидкость на основе полидиметилсилоксана и оксида графена, модифицированного хитозаном

П.А. Вовкотруб^{1,2}, В.В. Ломовкин^{1,2}, А.Ю. Вдовиченко¹, М.К. Рабчинский³,
Д.Ю. Столярова¹

¹Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт», Москва, Россия

²Московский физико-технический институт (НИУ), Долгопрудный, Россия

³Физико-технический институт имени А.Ф. Иоффе РАН, Санкт-Петербург, Россия

vovkotrub.pa@phystech.edu

DOI: 10.26902/Graphene-23-139

«Умные» жидкости являются перспективными рабочими телами в амортизаторах, системах виброконтроля, подвижных элементах роботов, электронике и чипах различного назначения. Подобные материалы уникальны в своей способности обратимо реагировать на изменения внешних факторов окружающей среды (света, тепла, электрических и магнитных полей). Электрореологические жидкости (ЭРЖ) – яркий пример «умных» материалов, чьи реологические свойства контролируемо изменяются под действием внешнего электрического поля (ВЭП) [1].

В данной работе представлен способ получения нанокomпозиционного наполнителя для ЭРЖ на основе оксида графена (ОГ), модифицированного низкомолекулярным хитозаном. Химическую структуру и морфологию частиц исследовали посредством ИК-спектроскопии, оптической и электронной микроскопии. Далее нанокomпозит диспергировали в полидиметилсилоксане низкой вязкости. Концентрацию наполнителя изменяли от 0.33 до 0.75 масс.%. Исследование структуры суспензий вне и под действием ВЭП проводили методом оптической просвечивающей микроскопии. Кривые течения и вязкости получали с помощью ротационного реометра Physica MSR 501 с высоковольтным внешним источником постоянного напряжения.

Результаты ИК-спектроскопии показали, что хитозан был успешно привит к поверхности ОГ посредством карбоамидных связей. После проведения цикла реологических и электрореологических испытаний образцов суспензий, было установлено, что полученная жидкость обладает выраженными электрореологическими свойствами. В работе показано, что без ВЭП характер течения суспензий соответствовал ньютоновскому, а при наложении поля у всех образцов появлялись пределы текучести и возрастали значения динамической вязкости. При напряженности поля в 7 кВ/мм жидкости с концентрациями наполнителя 0.33, 0.5 и 0.75 масс.% демонстрировали электрореологический отклик в 358, 520 и 1120 Па соответственно.

Работа выполнена при финансовой поддержке Госзадания НИИЦ «Курчатовский институт».

[1] Wang Y. et al. // Materials. 2022. V. 15, № 1. P. 311.

Мультисенсорные газоаналитические чипы на основе карбонилированного графена для селективного детектирования спиртов: от теории к практическим применениям.

В.С. Габрелян¹, А.С. Варезников², М.А. Соломатин², С.А. Рыжков¹, П.Д. Червякова¹, С.Д. Савельев¹, Г.А. Антонов¹, М.В. Байдакова¹, Д.Ю. Столярова³, Д.А. Кириленко¹, С.И. Павлов¹, М. Бржежинская⁴, В.В. Сысоев², М. К. Рабчинский¹

¹Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе, Политехническая 26, Санкт-Петербург, Россия

²СГТУ им. Ю.А. Гагарина, Политехническая ул., 77, Саратов, Россия

³НИЦ «Курчатовский институт», пл. Академика Курчатова, д. 1, Москва, Россия

⁴Helmholtz-Zentrum Berlin für Materialien und Energie, Hahn-Meitner-Platz 1, Берлин, Германия

Vladimir.Gabrelyan@mail.ioffe.ru

DOI: 10.26902/Graphene-23-140

В последнее время производные графена, получаемые на основе его функционализации – контролируемой ковалентной модификация краев и базальной плоскости определенными функциональными группами – находят все большее применение в различных областях, одной из которых является газовая сенсорика. Возможность управления химическим средством графена к различным газам и летучим органическим соединениям за счет введения заданных функциональных групп совместно с высокой удельной площадью поверхности, низким электрическим шумом и возможностью функционирования при комнатной температуре сделало производные графена одними из наиболее перспективных материалов для создания на их основе газовых сенсоров и мультисенсорных газоаналитических систем «Электронный нос».

В данной работе рассмотрен процесс создания газоаналитических сенсорных систем на мультиэлектродной подложке на основе одной из производных графена и изучены эксплуатационные характеристики изготовленного чипа. В качестве сенсорного слоя использована пленка карбонилированного графена с перфорированной структурой (К-ни), градиентом толщины от 5 до 125 нм и концентрацией карбонильных-групп до 12.5 ат.% [1]. Продемонстрирован повышенный хеморезистивный отклик К-ни графена на метанол и этанол при комнатной температуре в сравнении с чистым графеном. Методом теории функционала плотности показано, что усиление хеморезистивного отклика обусловлено присутствием большого количества карбонильных групп. Испытания мультиэлектродных чипов с К-ни графеном проводили при комнатной температуре без нагрева и внешних воздействий на поверхность сенсорного слоя. Полученные значения предела обнаружения составили 0.05 для метанола и 1.62 ppm для этанола при возможности селективного различения спиртов между собой. Кроме того, чипы оказались работоспособными при напусках во влажном воздухе. Помимо этого, проведены исследования его устойчивости, результаты которых продемонстрировали, что даже после многократных напусков высококонцентрированных аналитов сенсор сохраняет работоспособность в течение 18 месяцев.

Работа выполнена в рамках выполнения проекта РНФ № 19-72-10052.

[1] Rabchinskii M. K., Varezhnikov A. S., Sysoev V.V. et al. //Carbon. 2021. V. 172. P. 236-247.

Композиты на основе матрицы хитозана с графеном: электронный транспорт и тензорезистивный эффектД.И. Гапич^{1,2}, В.А. Кузнецов^{1,2}, А.С. Буинов³, Б.Ч. Холхоев³, В.Ф. Бурдуковский³¹*Институт неорганической химии им. А.В. Николаева СО РАН,
пр. Академика Лаврентьева, 3, Новосибирск, Россия*²*Новосибирский государственный технический университет,
пр. К. Маркса, 20, Новосибирск, Россия*³*Байкальский институт природопользования СО РАН, ул. Сахьяновой, 6, г. Улан-Удэ
dmitry.gapich@mail.ru***DOI: 10.26902/Graphene-23-141**

В настоящее время полимерные композиционные материалы привлекают все большее внимание, в том числе в области электронных устройств и современной электроники. Это связано в том числе с тем, что полимерные композиты являются перспективными для использования в качестве тензорезистивных элементов в условиях, недоступных для традиционных твердотельных металлических и полупроводниковых материалов. Например, для измерения развитых и повышенных деформаций, в том числе для мониторинга состояния здоровья человека. В качестве основы для изготовления биосовместимого тензорезистора перспективными материалами являются полимерные композиты на основе диэлектрической матрицы хитозана с добавлением наноструктурированных электропроводящих частиц. В рамках данной работы изучены тензорезистивные свойства и температурные зависимости электросопротивления композиционных полимеров с добавлением частиц графена. Результаты исследования позволили установить морфологию композитов—частицы графена в композитах разделены диэлектрическими прослойками, а при максимальных содержаниях графена частицы имеют непосредственный контакт друг с другом в путях протекания тока через образцы. Природа тензорезистивного эффекта заключается в изменении площади перекрытия между частицами графена при деформации композитов. Продемонстрирована работоспособность композитов в качестве тензорезистивных элементов в области развитых и повышенных деформаций.

Получение водорода из муравьиной кислоты на Pd-катализаторах, нанесённых на азотсодержащие углеродные материалы

Ф.С. Голубь, Д.А. Булушев, В.Н. Пармон

*Институт катализа СО РАН, Новосибирск, Россия**Fedorglb@gmail.com***DOI: 10.26902/Graphene-23-142**

Муравьиная кислота (МК) является перспективным жидким носителем водорода. Она обладает высокой стабильностью и объёмной водородной ёмкостью (53 гн₂/лнсоон). МК биоразлагаема и может быть получена из возобновляемой биомассы или путём связывания СО₂ в циклах с нулевым углеродным балансом.

С помощью простого и масштабируемого метода в данной работе были получены 1%-Pd катализаторы, нанесённые на модифицированный N-предшественниками сибунит. Для этого меламин (Mel) или дициандиамид (DCDA) смешивали с сибунитом в различных массовых соотношениях (1:4 – 1:1) и нагревали при температурах 400/550 °С. Активный компонент наносили методом пропитки носителей раствором Pd(асас)₂. Полученные образцы обрабатывали в токе 2.5% НСООН/Ar при 300 °С для удаления лигандов и стабилизации катализаторов [1].

Каталитические исследования показали, что модифицирование сибунита меламином может приводить к значительному увеличению активности и стабильности. Так, образец Pd/Mel/Sib 400 °С (1:2) оказался в 5 раз активнее эталонного Pd/Sib, не содержащего азота. Увеличение активности согласовывалось с кажущейся энергией активации реакции: для меламин-содержащих образцов её величина составила 32-35 кДж/моль, а для референсного Pd/Sib - 46 кДж/моль. Данные ПЭМ и РФЭС, полученные для образца Pd/Mel/Sib 400 °С (1:2) после каталитического цикла, свидетельствуют о наличии как атомарных форм Pd²⁺, так и наночастиц с размером ~1.6 нм. В то же время, на немодифицированном образце Pd находился преимущественно в металлическом состоянии со средним размером наночастиц 2.3 нм.

Мы считаем, что электронодефицитное атомарное состояния Pd²⁺ свидетельствует о сильном взаимодействии между азотными центрами носителя и активным компонентом, и обеспечивает высокую стабильность (не менее 5 ч) и активность (в 5 раз выше Pd/Sib) модифицированных меламином катализаторов в реакции разложения МК.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ (грант № 17-73-30032-П)

[1] Golub F.S., Beloshapkin S., Gusel'nikov A.V. et. al. // Energies. 2019. Vol. 12, №20, P. 3885-3898.

Карбоксиметилцеллюлоза как эффективный компонент для регулирования свойств проводящих чернил на основе графенаЕ.В. Дарханов^{1,2}, Е.А. Данилов²¹Московский институт электроники и математики им. А. Н. Тихонова (МИЭМ НИУ ВШЭ), Таллинская 34, Москва, Российская Федерация;²АО «НИИГрафит», Электродная 2с1, Москва, Российская Федерация.

makaroch817@gmail.com

DOI: 10.26902/Graphene-23-143

Печатная электроника является одним из основных направлений развития современной электроники благодаря тому, что струйная печать проводящими чернилами позволяет наносить тонкие плёнки и проводящие дорожки более простым и производительным способом в сравнении с литографическими процессами. На сегодняшний день большинство электропроводящих чернил содержат в своей основе наночастицы серебра или меди ввиду их высокой электропроводности, однако металлические наночастицы дороги, имеют высокую плотность и стоимость. Графен и родственные ему материалы перспективны для изготовления проводящих чернил благодаря высокой проводимости и возможности организации масштабного недорогого производства.

В настоящей работе исследованы свойства суспензий графена (графеновых чернил), полученных методом прямой ультразвуковой жидкофазной эксфолиации и предназначенных для применения в технологиях печатной электроники. Для повышения устойчивости к агломерации и седиментации предложено использовать карбоксиметилцеллюлозу в качестве стабилизатора. Основное внимание в докладе уделено влиянию концентрации карбоксиметилцеллюлозы на основные коллоидно-химические свойства суспензий: удельная электропроводность, вязкость, средний размер частиц и вид распределения частиц по размерам, поверхностное натяжение, седиментационная и агрегативная устойчивость.

В ходе исследований показано, что существует оптимальный интервал концентраций карбоксиметилцеллюлозы, в котором обеспечиваются наиболее высокие свойства суспензий при стабильности распределения частиц по размерам в течение не менее, чем четырех недель.

Синтез интеркалированных соединений фторированного графита с бромомА.В. Дроздова¹, Д.В. Пинаков²¹НГТУ-НЭТИ, Новосибирск, Российская Федерация²ИНХ СО РАН им. А.В. Николаева, Новосибирск, Российская Федерация

lika.drozdova.01@list.ru, pinakov@niic.nsc.ru

DOI: 10.26902/Graphene-23-144

Соединения на основе фторида графита относятся к соединениям включения и интересны в научном плане и в качестве функциональных углеродных материалов. Они используются в химических источниках тока и в качестве смазочных материалов, представляют интерес как твердые носители энергоемких и неустойчивых веществ, катализаторы органического синтеза, исходные вещества при получении наноразмерных функциональных композитов, молекулярные химические контейнеры для хранения, транспортировки и дозирования газов и летучих веществ.

Для синтеза использовался очищенный графит. Синтез соединений фторированного графита проводили в несколько стадий с использованием брома в качестве компонента-гостя для графитовой матрицы и разбавителя для фторирующего агента BrF_3 , что уменьшает взрывоопасность. Две навески очищенного графита (≈ 4 г) после насыщения бромом в закрытом объеме помещали в герметичный фторопластовый стакан над раствором BrF_3 в Br_2 (14.47% и 6.26%) и выдерживали в течение 42 суток при комнатной температуре. Затем сосуды из реакторов с фторокислителями переместили в новые реакторы над смесью KBr в Br_2 с целью удаления окислительной среды из межслоевых пространств, данная операция проводилась 5 раз. После чего образцы высушивали в потоке сухого азота.

В результате работы были получены два интеркалированных соединения фторированного графита с разной степенью фторирования: первое соединение имеет «ржавый» цвет, второе соединение серого цвета, близкое по цвету к исходному графиту.

Внедрение гостя сопровождается увеличением расстояния между слоями графитовой решетки. В процессе синтеза масса соединений увеличивается в 2.2–2.5 раза в зависимости от степени фторирования и количества внедрённого компонента.

Полученные интеркалированные соединения фторированного графита с бромом были проанализированы следующими методами: ИК-спектроскопия, элементный анализ, рентгеновская дифракция и рентгенофотоэлектронная спектроскопия.

Эффект бромирования пористого углерода на электрохимические свойства материалаС.Н. Ельсукова^{1,2}, А.Д. Ницакова¹, Ю.В. Федосеева¹, А.В. Окотруб¹¹Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт неорганической химии им. А.В. Николаева Сибирского отделения Российской академии наук, Новосибирск, Россия²Новосибирский государственный технический университет, Новосибирск, Россия
*sofi.elsu@yandex.ru***DOI: 10.26902/Graphene-23-145**

В настоящее время электрохимические суперконденсаторы являются перспективными перезаряжаемыми электрохимическими устройствами с высокими энергетическими и мощностными характеристиками, длительной циклируемостью и экологически безопасными основными компонентами. В качестве электродного материала используются модифицированные бромом пористые углеродные материалы. Целью работы являлось изучение влияния бромирования пористого углеродного материала на его электрохимические свойства в суперконденсаторах. Исследование морфологии, состава, текстуры и строения функционализированных образцов осуществлялось набором физико-химических методов. Концентрация брома составила 2 ат.%. Морфология и строение углеродного каркаса изменяются слабо после бромирования. Удельная площадь поверхности образцов уменьшилась от 1066 до 648 м²/г. Было обнаружено ковалентное присоединение брома к поверхности пористого углеродного материала и отсутствие интеркалированных молекул Br₂. Бромированные образцы показали увеличение удельной емкости в суперконденсаторах с водными электролитами по сравнению с исходными: для 1 М H₂SO₄ емкость увеличивается при медленной скорости развертки 5 мВ/с, а для 6 М КОН при высоких скоростях от 20 до 1000 мВ.

Исследование морфологии композитов сегрегированной сетчатой структуры на основе данных о механизмах транспорта носителей зарядаВ.А. Ермаков^{1,2}, В.А. Кузнецов^{1,2}, К.А. Шиянова³, М.В. Гудков³¹*Институт неорганической химии им. А.В. Николаева СО РАН, пр. Академика Лаврентьева, 3, Новосибирск, Россия*²*Новосибирский государственный технический университет, пр. К. Маркса, 20, Новосибирск, Россия*³*Федеральный исследовательский центр химической физики им. Н.Н. Семенова РАН, ул. Косыгина, 4, Москва, Россия**vova.ermakov111@gmail.com***DOI: 10.26902/Graphene-23-146**

В последнее время активно ведутся исследования по созданию электропроводящих полимерных композиционных материалов. Одна из основных задач при создании таких материалов заключается в оптимальном сочетании физико-механических и электропроводящих свойств. Для создания композитов с минимально возможными содержаниями электропроводящего наполнителя в полимерной диэлектрической матрице перспективным является подход по формированию композитов сегрегированной сетчатой структуры. В зависимости от выбранного типа полимера эти структуры могут иметь хорошие физико-механические свойства, которые определяются количеством спаек полимерных доменов при горячем прессовании полимерного порошка, гранулы которого предварительно покрыты частицами электропроводящей фазы [1]. Электропроводящие свойства таких материалов определяются типом наполнителя. В последнее время одним из перспективных электропроводящих наполнителей является восстановленный оксид графена ввиду большого аспектного отношения его частиц (толщина частиц один графеновый слой). Данная работа посвящена исследованию морфологии композитов на основе полимерных матриц фторопласта Ф-42, поливинилхлорида и сверхвысокомолекулярного полиэтилена с различными объемными содержаниями восстановленного оксида графена. Данные о морфологии получены методами оптической и электронной микроскопии, а также на основе анализа температурных зависимостей электросопротивления.

[1] Shiyanova K.A., Gudkov M.V., Gorenberg A.Y. et al. // ACS Omega. 2020. V. 5, № 39. P. 25148-25155.

Влияние добавки фторированных многостенных углеродных нанотрубок (МУНТ) на морфологию и эффективность органических фотовольтаических ячеекЕ.С. Кобелева¹, Н.В. Кравец¹, А.М. Кондранова², О.А. Гурова²¹Институт химической кинетики и горения им. В.В. Воеводского, г. Новосибирск²Институт неорганической химии им. А. В. Николаева СО РАН

gorgeouscleverowl@gmail.com

DOI: 10.26902/Graphene-23-147

В настоящее время вопрос о преобразовании солнечной энергии в электрическую посредством органических фотоэлементов является очень важным. Одна из главных проблем органической фотовольтаики – неоптимальная морфология донорно-акцепторного композита, используемого в качестве активной среды фотоэлектрических ячеек. Оптимизировать морфологию активного слоя можно путем введения высокостабильных материалов, в частности, углеродных нанотрубок. Но для того, чтобы использовать нанотрубки в органической фотовольтаике, требуется их хорошо разбить и индивидуализировать. Была разработана и применена методика диспергирования МУНТ: массивы вертикально ориентированных УНТ были получены в автоматизированном проточном газофазном химическом CVD-реакторе, при термическом разложении паров реакционной смеси на поверхности кремниевых подложек. В качестве прекурсора использовался 2%-й раствор ферроцена в смеси толуола-ацетонитрила 50/50 масс.%. После чего полученные МУНТ перемалывались на планетарной мельнице при охлаждении жидким азотом (77 К) и подвергались мягкому фторированию в парах BrF₃.

Для исследования влияния добавки фторированных МУНТ были изготовлены фотовольтаические ячейки с архитектурой ITO/PEDOT:PSS/Active Layer/LiF/Al с чистым композитом PCDTBT/PC₆₀BM и с композитом PCDTBT/PC₆₀BM с добавками МУНТ 2%, 1% и 0.5%. При измерении ячеек оказалось, что в случае добавки МУНТ к композиту улучшается FF (фактор заполнения) и КПД по сравнению с чистым композитом. Результаты измерений позволяют предположить, что добавка обработанных УНТ может оптимизировать морфологию активного слоя, что приводит к улучшению характеристик устройств.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ (грант №23-73-00072).

Характеризация фотодеградации органических фотовольтаических ячеек с добавлением фторированных углеродных нанотрубокН.В. Кравец¹, М.Н. Уваров¹, Е.С. Кобелева¹, О.А. Гурова², А.В. Окотруб², Л.В. Кулик¹¹Институт химической кинетики и горения им. В.В. Воеводского, г. Новосибирск²Институт неорганической химии им. А. В. Николаева СО РАН

n.kravets@kinetics.nsc.ru

DOI: 10.26902/Graphene-23-148

Органическая фотовольтаика – перспективное направление солнечной энергетики, так как органические фотовольтаические ячейки (ОФВЯ) на основе донорно-акцепторной смеси с объемным гетеропереходом обладают рядом преимуществ перед своими неорганическими аналогами. К ним относятся низкая стоимость изготовления, легкость, возможность нанесения на гибкие подложки методами промышленной печати. Однако существует ряд проблем при использовании данных устройств: ОФВЯ оказываются менее стабильными ввиду низкой устойчивости органических материалов к влаге и кислороду; морфология донорно-акцепторного слоя является термодинамически нестабильной, оказывая отрицательное влияние на показатели ОФВЯ [1]. Для решения вышеуказанных проблем в современном мире применяется подход добавления третьего компонента в активный слой с объемным гетеропереходом [2]. Такие системы помогают увеличить не только стабильность за счет упорядочения морфологии поверхности, но и эффективность переноса заряда в системе донор-акцептор для ОФВЯ. Примером таких компонентов могут выступать различные наночастицы оксидов металлов, графен и его производные, а также углеродные нанотрубки (УНТ) [3].

В работе была проведена характеристика фотодеградации ОФВЯ и определены вольт-амперные характеристики для ОФВЯ с различной архитектурой для хорошо исследованных композитов: PCDTBT/PC₆₀BM и P3NT/PC₆₀BM с добавкой фторированных УНТ (F-УНТ). Так, при изучении фотодеградации ОФВЯ было показано, что при добавлении в активный слой F-УНТ происходит увеличение характерного времени фотодеградации и стабилизация КПД на временах, превышающих 1200 часов.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ (грант №23-73-00072).

[1] Zhang G., Lin F.R., Qi F., et al. // Chem. Rev. 2022. V. 122, № 18. P. 14180-14274.

[2] Doumon N.Y., Yang L., Rosei F. // Nano Energy. 2022. P. 106915.

[3] Salim T., Lee H.-W., Wong L.H., et al. // Adv. Funct. Mater. 2016. V. 26, №1. P. 51-65.

Фотохимическая иммобилизация аптамеров на канале графенового транзистора для обнаружения маркера сердечно-сосудистых заболеваний

А.С. Кудрявцева, Н.П. Некрасов, И.И. Бобринецкий

*Национальный исследовательский университет «МИЭТ», площадь Шокина дом 1,
г. Москва, г. Зеленоград, Россия
lekassy2000@gmail.com*

DOI: 10.26902/Graphene-23-149

В настоящее время для диагностики сердечной недостаточности используют белок NT-proBNP, предел детектирования которого сенсорами составляет 10 пг/мл [1]. В данной работе представлен новый принцип формирования детекторов за счет фотохимического ковалентного связывания аптамеров с каналом графенового полевого транзистора. Исследование канала транзистора до и после иммобилизации аптамеров происходит с помощью атомно-силовой микроскопии, спектроскопии комбинационного рассеяния света, измерения вольт-амперных характеристик. Применение метода прямого прикрепления биорецепторов к поверхности углеродного наноматериала приводит к короткому времени отклика (75 с) и увеличению чувствительности до наименьшего предела обнаружения 0.01 пг/мл. Сформированный сенсор обладает специфичностью детектирования в присутствии другого биомаркера сердечно-сосудистых заболеваний.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ (грант № 19-19-00401-П).

[1] Munief W. M. et al. //Biosensors Bioelectron. 2019. V. 126. P. 136-142.

Исследование сорбционных свойств многослойного графена для концентрирования и определения тяжелых металловВ.Д. Курбатова^{1,2}, А.О. Фролова^{1,2}, Н.С. Медведев¹, А.В. Волженин¹, А.И. Сапрыкин^{1,2}¹Институт неорганической химии им. А. В. Николаева СО РАН, пр. Академика Лаврентьева 3, г. Новосибирск, Россия²Новосибирский государственный университет, ул. Пирогова, 2, г. Новосибирск, Россия
v.kurbatova1@g.nsu.ru**DOI: 10.26902/Graphene-23-150**

С развитием промышленности тяжелые металлы, такие как кадмий, ртуть, теллур, мышьяк и др., а также их соединения могут попадать в окружающую среду. В связи с этим важной задачей является разработка высокочувствительных методик количественного химического анализа, обеспечивающих возможность экологического мониторинга вод и биологических объектов. Многочисленные исследования показали перспективность применения углеродных сорбционных материалов для последующего анализа объектов различной природы. Многослойный графен (МСГ) обладает высокой сорбционной емкостью и может применяться как для извлечения тяжелых металлов из растворов, так и для их концентрирования при выполнении анализа. Настоящая работа направлена на изучение процессов сорбции тяжелых металлов с использованием сорбционных материалов на основе МСГ и разработку комбинированных методик определения тяжелых металлов с применением методов масс-спектрометрии с индуктивно связанной плазмой (ИСП-МС), атомно-эмиссионной спектрометрии с индуктивно связанной плазмой (ИСП-АЭС) и двухструйной дуговой плазмой (ДДП-АЭС). Изучены процессы сорбции ТМ на МСГ, выбраны условия группового сорбционного концентрирования тяжелых металлов. Выполнена оптимизация инструментальных параметров количественного химического анализа. Представлены результаты использования электротермического испарения для прямого анализа сорбентов и их суспензий без десорбции аналитов.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ (грант № 23-23-00058).

Роль стереохимии оксида графена в реологических и оптических свойствах его водных суспензий

В.В. Ломовкин^{1,2}, Д.Ю. Столярова¹, П.А. Вовкотруб^{1,2}, А.Ю. Вдовиченко¹,
М.К. Рабчинский³

¹НИЦ Курчатовский Институт, пл. Академика Курчатова, 1, Москва, Россия

²Московский физико-технический институт (НИУ), Долгопрудный, Москва, Россия

³Физико-технический институт имени А.Ф. Иоффе РАН, Санкт-Петербург, Россия

lomovkin.vv@phystech.edu

DOI: 10.26902/Graphene-23-151

В настоящее время проблема получения функциональных материалов приобретает все большую актуальность. Интерес к материалам такого рода обусловлен их способностью контролируемо реагировать на изменения внешних факторов окружающей среды. В этой области активный интерес привлекает оксид графена (ОГ) – двумерный кристалл углерода, покрытый кислородсодержащими группами, обуславливающими комбинацию его уникальных физико-химических свойств и широкие возможности применения. Влияя на стереохимическую структуру ОГ можно задавать оптические, электрофизические и реологические свойства его суспензий для создания чувствительных элементов газовых датчиков, биосенсоров и накопителей энергии.

В литературных источниках представлено влияние концентрации, латерального размера частиц и степени окисления ОГ на вязкоупругие характеристики его водных суспензий. Также в литературе был рассмотрен способ модификации ОГ путём мягкой термической обработки, в результате которой происходит изменение спектра оптического поглощения ОГ и перераспределение функциональных групп на его поверхности, но влияние данных факторов на реологическое поведение в литературе ещё не было представлено. Таким образом, целью данной работы является изучение влияния термической обработки, на взаимодействие частиц между собой в водной среде.

Методами ротационной вискозиметрии определен полный спектр вязкоупругих характеристик образцов суспензий термостатированного от 0 до 120 часов при 80 °С ОГ. Установлено, что все образцы обладают пределом текучести, и их динамическая вязкость при концентрациях от 0.1 до 0.8 масс.% возрастает с увеличением времени термостатирования. На основании спектрофотометрических исследований водных суспензий ОГ в концентрациях от 0.0005 до 0.0025 масс.% было установлено: термостатирование не приводит к существенным изменениям спектра оптического поглощения ОГ, что позволяет применять спектрофотометрический метод для анализа концентраций водных суспензий ОГ и может подтверждать перераспределение функциональных групп.

Выполнено при финансовой поддержке Госзадания НИЦ «Курчатовский институт».

Фотолюминесценция двумерных наноллистов MoS₂, полученных методом жидкостной эксфолиации

М. Ю. Лукьянов, О.В. Бондарева, С.А. Евлашин
Сколковский институт науки и технологий, Москва, Россия
S.Evlashin@skoltech.ru

DOI: 10.26902/Graphene-23-152

Уникальные свойства двумерных материалов делают их привлекательными для применения в различных областях. Одной из перспективных ниш являются оптические приложения, в которых такие материалы демонстрируют чрезвычайно чувствительные характеристики и могут быть использованы для фотоэлектрических, фотокаталитических применений. Однако оптические свойства двумерных материалов, полученных методом жидкофазной эксфолиации (ЖФЭ), требуют детального изучения [1].

Целью данного исследования является изучение поглощающих и люминесцентных свойств MoS₂, эксфолиированного с добавлением холата натрия (Sodium cholate (SC)), который является наиболее часто используемым поверхностно-активным веществом (ПАВ). В данной работе ЖФЭ проводилась с использованием двух различных способов физической обработки: ультразвуковой ванны и миксера сдвигового напряжения; в двух различных растворителях: воде (H₂O) и диметилсульфоксиде (DMSO). Наилучшее качество наноллистов MoS₂ было достигнуто при использовании ЖФЭ со сдвиговым напряжением, с добавлением холата натрия в качестве поверхностно-активного вещества. Фотолюминесцентные свойства наноллистов MoS₂ незначительно изменялись для концентраций ПАВ в диапазоне концентраций C(SC) = 0.5–2.5 мг/мл. Данная работа имеет большое практическое значение для дальнейшего улучшения фотолюминесцентных свойств MoS₂ путем химической функционализации.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант № 22-73-10198).

[1] Coleman J.N. et al. // Science. 2011. V. 331, № 6017. P. 568-571.

Исследование трибологических свойств масел с графеновыми присадками, полученных путём жидкостной фазовой эксфолиации графита

С.Ю. Мишаков, С.В. Ткачев

ООО «НПО «Графеника», ул. Пермская, д. 1, стр. 7-8, Москва, Россия

*s.mishakov@mail.ru***DOI: 10.26902/Graphene-23-153**

Разработана методика модифицирования смазочных масел графеновыми или графенсодержащими добавками с помощью процесса жидкостной фазовой эксфолиации. В ходе эксперимента было установлено, что при добавлении к маслам мультислойных графеновых чешуек (далее «графен»), полученных путём эксфолиации активированного мелкодисперсного графита в количестве от 0.01% до 0.25% по массе, можно существенно повысить трибологические характеристики масел.

Трибологические свойства каждого гомогенизированного масляного состава были протестированы с использованием прибора для экспресс-оценки износостойкости поверхностей при колебательном реверсивном движении (схема трения «шар-плоскость»). Определяющими параметрами в этом исследовании были объём и размеры зоны износа на образцах. Сферические инденторы Ø5 были изготовлены из стали ШХ15 с твёрдостью 58–65 HRC, а образцы из стали 30ХГСА с твёрдостью 30 HRC. Нагрузка в контакте составила $N = 25$ Н. Частота возвратно-поступательного движения $n = 76.8$ двойных колеб/мин. Максимальная скорость скольжения в средней точке $V_{\max} = 0.073$ м/с. Время испытания составляло 20 минут. Результаты показали, что оптимальное содержание графена в минеральном масле И-20 для достижения наименьшего размера пятна износа при возвратно-поступательном движении составляет 0.05% по массе. Объём износа основы для оптимального масляного состава (И-20 + 0.05% графена по массе), по сравнению с чистым маслом без присадок, снизился на 58.9%.

Таким образом, использование графеновых присадок в смазочных маслах может стать одним из перспективных направлений развития технологий в области смазочных материалов.

Влияние условий синтеза никелевых катализаторов на дисперсность металла и каталитические свойства в реакции получения водорода из муравьиной кислоты

А.Д. Нищачова¹, Д.А. Булушев², Ю.В. Шубин¹, С.В. Трубина¹, О.А. Стонкус²,
А.В. Окотруб¹, Л.Г. Булушева¹

¹*Институт неорганической химии им. А.В. Николаева СО РАН, пр. Академика
Лаврентьева, 3, Новосибирск, Россия*

²*Институт катализа им. Г.К. Борескова СО РАН, пр. Академика Лаврентьева, 5,
Новосибирск, Россия
nishchakova@niic.nsc.ru*

DOI: 10.26902/Graphene-23-154

Катализаторы, содержащие никель в высокодисперсном состоянии, способны показывать бóльшую эффективность в различных каталитических реакциях по сравнению с наночастицами [1]. Для достижения металла в таком состоянии необходимо качественно подбирать метод и условия синтеза, а также носитель, способный стабилизировать атомы и кластеры металла в условиях реакции.

В данной работе катализаторы, содержащие 3 масс.% никеля, были синтезированы простым методом пропитки носителя раствором ацетата никеля в тетрагидрофуране с последующим разложением кислотных остатков при 350 °С. В процессе синтеза были варьированы носитель: Ni(OAc)₂ наносился на азотсодержащий пористый углеродный материал (N-ПУМ) и на N-ПУМ, содержащий 1 масс.% никеля в виде Ni-N₄ центров [2]. Разложение осажденного ацетата никеля проводили в двух средах – восстановительной (2.5 об.% HCOOH в Ar) и инертной (Ar). Полученные катализаторы были исследованы методами РФА, РФЭС и EXAFS. Образцы, полученные в инертной атмосфере, содержали никель в виде моноатомов и кластеров, состоящих из нескольких атомов металла, тогда как образец, полученный в восстановительной среде, содержал наночастицы со средним размером 2 нм. По результатам DFT расчетов изначальное присутствие Ni-N₄ центров на носителе обеспечило высокую дисперсию никеля [3]. Каталитические свойства полученных катализаторов были испытаны в газофазной реакции разложения муравьиной кислоты. Все образцы показали близкую активность. Для катализатора, содержащего наночастицы, кажущаяся энергия активации была выше (128 кДж/моль), чем для двух других, содержащих никель в высокодисперсном состоянии (105 и 110 кДж/моль).

[1] Nishchakova A.D., Bulusheva L.G., Bulushev D.A. // *Catalysts*. 2023. V. 13, № 5. P. 845.

[2] Bulushev D.A., Nishchakova A.D., Trubina S.V. et al. // *J. Catal.* 2021. V. 402. P. 264-274.

[3] Nishchakova A.D., Bulushev D.A., Trubina S.V. et al. // *Nanomaterials*. 2023. V. 13. № 3. P. 545.

Анализ электродинамических характеристик материалов на основе ОУНТ и графена в сантиметровом диапазоне радиоволн.**З.Н. Нуриахметов^{1,2,3}, Д.В. Смовж², Ю.Д. Черноусов¹**¹*Институт химической кинетики и горения им В. В. Воеводского СО РАН, 630090, Российская федерация, Новосибирск, Институтская ул., 3*²*Институт теплофизики им. С.С. Кутателадзе СО РАН, 630090, Российская Федерация, Новосибирск, пр. ак. Лаврентьева, д. 1*³*Новосибирский национальный исследовательский государственный университет, 630090, Российская Федерация, Новосибирск, ул. Пирогова, д. 1**zaur.nuriakhmetov@gmail.com***DOI: 10.26902/Graphene-23-155**

В данной работе исследованы электродинамические характеристики различных покрытий на подложке из полиэтилентерефталата (ПЭТ). Покрытия состояли из одностенных углеродных нанотрубок (ОУНТ), как очищенных от катализатора, так и с присутствием катализатора, однослойного графена и наночастиц железа в аморфной углеродной матрице. Для качественного сравнения также использовалась медь. Покрытия из ОУНТ наносились на подложку методом аэрозольного распыления, включающим в себя диспергацию суспензии ультразвуком и аэрографическое распыление на полимер с последующим выпариванием жидкого компонента, графен синтезировался методом ХОГФ и переносился на подложку методом горячего прессования. Коэффициенты пропускания и отражения покрытий в S диапазоне СВЧ волн измерялись с помощью анализатора цепей Agilent N5239A, помещая образец в поперечной плоскости волновода размером 72x34 мм². Также исследовано влияние покрытий на резонансную частоту и добротность цилиндрического резонатора на моде E010, устанавливая образец в максимум электрического поля резонатора. Полученные результаты показали, что покрытия на основе ОУНТ имеют сравнимый с медью коэффициент отражения, но также обладают достаточно высоким коэффициентом пропускания (-45 dB). Коэффициент пропускания графена составляет около -3 dB, при этом имея достаточно низкий коэффициент отражения (-15 dB). Кроме того, показано, что композиты на основе ОУНТ обладают свойствами металла с низкой проводимостью, получена оценка проводимости таких покрытий, наночастицы железа - только диэлектрическими, а графен - высокой поглощающей способностью. Это свидетельствует о перспективности использования таких материалов для создания СВЧ устройств.

Ультрабыстрые процессы в нанотрубках из дисульфида вольфрама

М.И. Пауков¹, А.Е. Гольдт², П. Мишра¹, Д.И. Якубовский¹, А.В. Сюй¹, А.А. Мельников³,
Г.А. Командин⁴, А.Г. Насибулин², А.В. Арсенин¹, В.С. Волков¹, М.Г. Бурданова^{1,5}

¹Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет), г. Долгопрудный, Институтский пер., 9, Долгопрудный, Россия

²Сколковский институт науки и технологий, ул. Нобеля, 3, Москва, Россия

³Институт спектроскопии РАН, ул. Физическая, 5, Троицк, Россия

⁴Институт общей физики имени А.М. Прохорова РАН, ул. Вавилова, 38, Москва, Россия

⁵Институт физики твёрдого тела имени Ю.А. Осипьяна РАН, ул. Академика

Осипьяна, 2, Черноголовка, Москва

paikov.mi@phystech.edu

DOI: 10.26902/Graphene-23-156

В данной работе изучаются нанотрубки из дисульфида вольфрама WS_2 , относящиеся к классу ДПМ, методами электронной микроскопии и рамановской спектроскопии, спектроскопии поглощения в ультрафиолетовом-видимом-ИК диапазонах, терагерцовой спектроскопии временного разрешения, спектроскопии нестационарного поглощения в видимом диапазоне, а также спектроскопии оптической накачки - терагерцового зондирования. Данные методы позволяют изучить оптические и электронные свойства не только в равновесии, но и в неравновесном состоянии. Преимуществом последних двух методик является способность разрешать ультрабыстрые неравновесные процессы и их релаксацию.

Изучаемые образцы представляли из себя вакуумно фильтрованные [1] пленки из диспергированных в этаноле WS_2 НТ, нанесённые на подложку из z-среза кварца. Статистика, полученная основе изображений пропускающей и сканирующей микроскопии, показала, что средний диаметр нанотрубок составил 94 нм, их длина порядка 1 мкм. Кроме того, снимки позволяют утверждать, что массив нанотрубок не имеет выделенных направлений, а сами нанотрубки являются многостенными.

Рамановские моды исследуемых плёнок при длине лазера $\lambda = 532$ нм, соответствующие продольным (E_{2g}^1) и поперечным (A_{1g}) фононным колебаниям, наблюдались на частотах 417 и 351 cm^{-1} , соответственно. Также были определены дефектные моды.

Широкополосная спектроскопия WS_2 НТ показала экситонные пики поглощения на 670, 560 и 500 нм, а также малый отклик свободных носителей заряда, описываемый моделью Лоренца, в терагерцовой области частот.

WS_2 НТ имеют существенную фотопроводимость в терагерцовой области, живущую на масштабе десятков пикосекунд. Проведена оценка подвижности неравновесных носителей заряда: от 100 до 300 $cm^2/V \cdot s$ (диапазон мощностей накачки от 0 до 3 $мкДж/см^2$). Исследование динамики пропускания показало, что ключевыми процессами в ТГц области являются захват зарядов на поверхностных состояниях и дефектах.

Динамика поглощения в видимой области вблизи экситонных резонансов показала характерные линии фотопросветления и фотопоглощения. Изучена динамика неравновесных носителей в видимой области, показавшая взаимодействие экситонов друг с другом. Определены константы скорости такого взаимодействия.

Таким образом, в нашей работе мы изучили равновесные свойства нанотрубок из дисульфида вольфрама, а также поведение неравновесных носителей заряда, созданных фотовозбуждением.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (грант № 075-15-2022-1150).

[1] Nasibulin A.G., Moisala A., Brown D.P. et al. // Chem. Phys. Lett. 2005. V. 402, P. 227-232.

Высокочувствительные сенсоры на основе графена для анализа растворовД.А. Потеряев^{1,2}, А.И. Иванов¹, И.В. Антонова^{1,2}¹Институт физики полупроводников СО РАН, Новосибирск, Россия²Новосибирский государственный технический университет, Новосибирск, Россия

poteryayevd@inbox.ru

DOI: 10.26902/Graphene-23-167

В работе исследованы электрофизические характеристики пленок, созданных по технологии струйной 2D-печати, из композитных слоев на основе графена, частиц h-BN и проводящего полимера PEDOT:PSS, найдены условия формирования композитных частиц непосредственно в суспензии, определена морфология структур из пленок разного состава, исследовано влияние различных внешних воздействий на проводимость структур (использование проводящих композитных пленок в качестве сенсоров различного типа – сенсоры влажности, химические сенсоры для анализа растворов). Показано, что добавление PEDOT:PSS в количестве ($4 \cdot 10^{-3}$ масс.%) и этиленгликоля (30 об.%) в суспензию привело к росту проводимости всей системы в широком диапазоне соотношений G:h-BN в составе суспензий (уменьшает поверхностное сопротивление до значений 1 кОм/□), а также позволило нивелировать воздействие деформации растяжения, возникающей при изгибе на сопротивление структур до 3-5 %.

Также в работе исследовано влияние дизайна структур (печатные структуры, нити и лески, покрытые графеном) и типа подложки на отклик и возможность многократного использования сенсоров. Планарные структуры на бумажной подложке демонстрируют значительное изменение тока до 5-6 порядков при использовании их в качестве сенсоров влажности или для анализа растворов на водной основе. Такая высокая чувствительность связана с использованием тонких слоев, когда частицы располагаются не только горизонтально, но и вертикально на целлюлозных волокнах, и эффективной адсорбцией воздействующих веществ на краевые состояния и дефектные центры этих частиц, приводящей к изменению их проводимости. Нити и лески, покрытые графеном, показывают отклик величиной до 3 порядков и принципиальное различие знака изменения сопротивления для паров воды и паров глюкозосодержащих водных растворов.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ (грант № 22-19-00191)

Моделирование и расчёт свойств графиновых углеродных соединений на основе L₄₋₆₋₈ графена

Д.Д. Саляхова, В.В. Мавринский
ФГБОУ ВО «МГТУ им. Г.И. Носова», Магнитогорск, Россия
saliakhova99@mail.ru

DOI: 10.26902/Graphene-23-157

В настоящее время наноматериалы пользуются особой популярностью, поскольку находят свое приложение в новых сферах [1]. Поэтому, в связи с установленной возможностью синтеза новых небензоидных графенов со встроенными негексагональными кольцевыми образованиями [2], становится актуальным моделирование новых гибридных соединений, в основе которых лежит нетипичный графен L₆ [3]. В данной работе проводится анализ, моделирование и исследование свойств новых групп графиновых соединений - графинов на основе полиморфной разновидности графена L₄₋₆₋₈. Установлено, что на основе каждой из полиморфных разновидностей такого графена возможно формирование семи различных графинов (одной α -, трех β - и трех γ -структур), содержащих минимальное количество атомов в неэквивалентных позициях.

Расчет энергетически оптимизированных структур был выполнен методами молекулярной динамики (ММ+), полуэмпирическим квантово-механическим методом (PM3) и методом теории функционала плотности в обобщенном градиентном приближении (DFT-GGA). Расчеты показали, что из всех смоделированных структур три структуры оказались неустойчивыми и при оптимизации их структура частично переходит в графеновую. Элементарные ячейки устойчивых структур – прямоугольные. Впервые для всех устойчивых структур были построены зонная структура и плотность электронных состояний. Установлено, что среди таких слоев имеются два проводника и два узкозонных полупроводника.

- [1] Щегольков А.В., Щегольков А.В., Комаров Ф.Ф. и др. // Вестник Магнитогорского государственного технического университета им. Г.И. Носова. 2021. Т.19, №4. С. 71-81.
[2] Qitang F. et al. // Science. 2021. V. 372. P. 852-856.
[3] Новосёлов К. С. // УФН. 2011. Т. 181, № 12. С. 1299.

Влияние азотирования и присоединения ОН-групп на квантовую емкость графенаТ.А. Сапежинская^{1,2}, Н.Г. Бобенко²¹*Национальный Исследовательский Томский Государственный Университет,
Томск, Россия*²*Институт Физики Прочности и Материаловедения СО РАН, Томск, Россия
litanyaalex@gmail.com***DOI: 10.26902/Graphene-23-158**

Экспериментальные исследования электроемкости (C_{tot}) углеродных нанотрубок и графена показали, что легирование азотом и функционализация кислородными группами существенно повышает C_{tot} [1,2]. Однако, обнаруженное увеличение C_{tot} еще не до конца объяснены теоретически. В настоящей работе с использованием метода функционала электронной плотности исследована квантовая емкость (C_Q) ячеек графена 3×5 и 5×5 с различными типами азотных дефектов (замещение, пиридиновый и пиррольный азот с концентрацией 2 и 4%), а также с азотом замещения и присоединенной ОН-группой. Обнаружено, что щель в плотности электронных состояний ($D(E)$) не открывается для всех исследуемых структур. Расчёт C_Q проводился с использованием выражения: $C_Q(V) = \frac{1}{mV} \int_0^V eD(E_F - eV)dV$, где m – масса образца, e – заряд электрона, а V – смещение, рассчитывалось как изменение уровня Ферми (E_F) при изменении заряда объекта. Обнаружено, что C_Q модифицированного графена для всех исследуемых структур повышается относительно бездефектного графена, что качественно совпадает с измеренной в работе [3] C_Q дефектного графена. Полученные результаты вносят вклад в объяснение изменений C_{tot} при азотировании и кислородной функционализации графена, а также важны для разработки суперконденсаторов на его основе.

Работа выполнена в рамках государственного задания ИФПМ СО РАН, тема номер FWRW-2022-0002 и при финансовой поддержке гранта Эндаумент-фонда.

- [1] Xu Q., Yang G., Fan X. et al. // ACS Omega. 2019. V. 4, № 8. P. 13209–13217.
 [2] Korusenko P.M., Nesov S.N., Iurchenkova A.A. et al. // Nanomaterials. 2021. V. 11, № 9. P. 1–19.
 [3] Xia J., Chen F., Li J., Tao N. // Nature Nanotechnology. 2009. V. 4, № 8. P. 505–509.

Исследование влияния нанопокрyтия графен/Ni на механические свойства поверхности Ni: атомистическое моделирование

Л.Р. Сафина, Ю.А. Баимова, Р.Р. Мулюков

*Институт проблем сверхпластичности металлов РАН, ул. Степана Халтурина 39,
Уфа, Россия
saflia@mail.ru***DOI: 10.26902/Graphene-23-159**

На сегодняшний день ученые разрабатывают различные защитные антикоррозионные, полимерные покрытия, чтобы улучшить свойства поверхностного слоя металла и защитить его от внешних воздействий. С этой точки зрения, композиты графен/Ni вызывают большой интерес, так как обладают повышенными механическими свойствами и могут быть рассмотрены в качестве таких нанопокрyтий [1]. В данной работе методом молекулярной динамики исследуется влияние композитного нанопокрyтия графен/Ni (где матрицей является графен, а наполнителем – наночастицы Ni) на механические свойства поверхности никеля.

Для исследования выбран образец Ni(111) размером 15.5×15.2×5.1 нм, покрытый композитной нанопленкой графен/Ni разной толщины: 1.0, 1.5, 2.3, 3.5 и 5.1 нм. Оценка механических свойств проводится посредством одноосного растяжения. Численные эксперименты выполняются в свободно распространяемом пакете молекулярно-динамического моделирования LAMMPS. Во всех случаях используются периодические граничные условия. Для описания взаимодействия атомов C-C, Ni-C, Ni-Ni используются потенциалы, представленные в работе [1].

В результате моделирования выявлено, что композит графен/Ni значительно повышает механические свойства поверхности металла. Получено, что чем больше толщина нанопокрyтия, тем выше прочность соединения. Показано, что композитное нанопокрyтие графен/Ni является перспективным для применения в качестве упрочняющих, защитных нанопокрyтий для металлической поверхности.

[1] Safina L.R., Krylova K.A., Vaimova J.A. // Mater. Today Phys. 2022. V. 28. P. 100851.

Исследование свойств мезопористых углеродных материалов, полученных с помощью твердого темплатаЮ.Е. Синельникова^{1,2}, Н.Ф. Уваров^{1,2}¹*Институт химии твердого тела и механохимии СО РАН, ул. Кутателадзе 18,
г. Новосибирск, Россия*²*Новосибирский государственный технический университет, пр. К. Маркса 20,
г. Новосибирск, Россия**yu.sinelnikova.2014@stud.nstu.ru***DOI: 10.26902/Graphene-23-160**

Высокопористые углеродные материалы обладают большой удельной поверхностью, высокой химической и термической стабильностью, а также хорошей электропроводностью. Эти уникальные свойства позволяют применять пористые углеродные материалы в таких областях науки, как катализ [1], адсорбция, транспорт лекарственных средств, электрохимическое накопление и преобразование энергии [2]. Одним из простых и наиболее эффективных методов синтеза пористых углеродных материалов является темплатный синтез с использованием твердых темплатных агентов [3]. С помощью данного метода можно получать материалы с заданным размером и формой пор, используя для этого различные темплатные агенты.

В данной работе представлен темплатный метод получения мезопористых углеродных материалов пиролизом фенолформальдегидной смолы. В качестве темплатного агента используется нанокристаллический оксид магния, который образуется при термоллизе цитрата магния *in-situ* в полимерной матрице. В ходе работы была синтезирована серия образцов, содержащая фенол:цитрат магния в соотношении от 0:10 до 10:0. Для всех полученных образцов была определена удельная площадь поверхности, а также выявлена закономерность изменения удельной поверхности от содержания цитрата магния в исходной смеси. С помощью метода БЭТ адсорбции азота и просвечивающей электронной микроскопии для образца, поверхность которого достигает 2000 м²/г, был оценен диаметр образующихся пор после удаления темплатного агента.

Исследование выполнено при финансовой поддержке в рамках реализации программы развития НГТУ, научный проект № С23-31.

[1] Banham D., Feng F., Fürstehaupt T. et al. // *Catalysts*. 2015. V. 5. P. 1046–1067.

[2] Xu H., Li H., Xie L., Zhao D. et al. // *Adv. Mater. Interfaces*. 2022. V. 9. P. 2101998.

[3] Morishita T., Tsumura T., Toyoda M. et al. // *Carbon*. 2010. V. 48. P. 2690–2707.

Электронная структура двумерных плёнок $(2\sqrt{3}\times 3)\text{Bi}/\text{InAs}(111)\text{A}$

Н.Ю. Соловова^{1,2}, В.А. Голяшов^{1,2}, С.В. Еремеев³, Л.В. Бондаренко⁴, А.Ю. Тупчая⁴,
Д.В. Грузнев⁴, А.А. Саранин⁴, О.Е. Терещенко^{1,2}

¹Новосибирский государственный университет, ул. Пирогова, 2, Новосибирск, Россия

²ИФП СО РАН, ул. Академика Лаврентьева, 13, Новосибирск, Россия

³Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, пр. Академический, 2/4,
Томск, Россия

⁴Институт автоматики и процессов управления ДВО РАН, ул. Радио, 5,
Владивосток, Россия

n.solovova@g.nsu.ru

DOI: 10.26902/Graphene-23-161

Открытие графена и его свойств вызвало интерес к изучению других графеноподобных материалов, имеющих большую ширину запрещённой щели в дираковском спектре, что необходимо для управления проводимостью таких структур и создания приборов на их основе. На размер щели влияют величина спин-орбитального взаимодействия в материале и выбор подложки. Поэтому интерес представляют двумерные слои материалов из тяжелых элементов, например, висмута, на полупроводниковых подложках.

В данной работе была изучена электронная и кристаллическая структура тонких плёнок висмута на поверхности $\text{InAs}(111)\text{A}$ -(2x2).

Было показано, что осаждение висмута на поверхность $\text{InAs}(111)\text{A}$ -(2x2) при температуре ~ 250 °С приводит к росту островков Bi с эффективной высотой около 3.5 Å и реконструкцией поверхности $(2\sqrt{3}\times 3)$. Методом сканирующей туннельной микроскопии было показано, что островки состоят из доменов с прямоугольной элементарной ячейкой с латеральными размерами $\sim 13\times 15$ Å. В рентгеновских фотоэлектронных спектрах не наблюдались химические сдвиги, соответствующие связям Bi-As и Bi-In, что указывает на формирование квазисвободной двумерной структуры. С помощью фотоэлектронной спектроскопии с угловым разрешением было выявлено, что в электронной структуре сохраняются состояния двумерного электронного газа вблизи поверхности InAs . При этом в запрещённой зоне InAs в Γ точках зоны Бриллюэна сверхструктуры $(2\sqrt{3}\times 3)$ появляются параболические электронные и дырочные состояния висмута с сильной анизотропией ($m_e^* \sim 0.2m_0 - 0.6m_0$ и $m_h^* \sim 0.2m_0 - 0.4m_0$, где m_0 – масса свободного электрона). Общая электронная структура системы $(2\sqrt{3}\times 3)\text{Bi}/\text{InAs}$ обладает полупроводниковым характером с шириной запрещённой зоны ~ 150 мэВ.

Работа выполнена при финансовой поддержке программы Приоритет-2030.

Графеновый сенсор для определения гидродинамических параметров жидкости

Д.В. Сорокин, В.А. Андриющенко, Д.В. Смовж

*Институт теплофизики им. С.С. Кутателадзе СО РАН, пр. Лаверентьева, 1,
г. Новосибирск, Россия**НГУ, ул. Пирогова 2, Новосибирск, Россия**d.sorokin@g.nsu.ru***DOI: 10.26902/Graphene-23-162**

Графен обладает многими удивительными физическими свойствами, такими как чрезвычайно высокая подвижность носителей заряда, рекордно высокая теплопроводность, максимальное отношение площади поверхности к объёму, а также прозрачность в видимом диапазоне длин волн, что делает его очень привлекательным в различных приложениях, включая прозрачные электроды, транзисторы, датчики молекул, фотодетекторы и т. д. Одно из перспективных направлений развития графеновых устройств, является измерение гидродинамических параметров жидкости. Важным преимуществом такого датчика является его размер. Двумерная структура графена позволяет использовать его для мониторинга параметров течения в различных микроканальных системах, где применение традиционных систем измерения вносит существенные возмущения в поток.

Настоящая работа посвящена экспериментальному и теоретическому исследованию электрофизических свойств графена при движении дистиллированной воды. Для установления характера зависимости изменения сопротивления графенового образца от скорости потока дистиллированной воды, приведённой в контакт с ним, создан экспериментальный стенд и канал прямоугольной формы. В результате движения воды вдоль поверхности графена, обнаружен эффект резкого уменьшения сопротивления при запуске потока и дальнейший выход на первоначальное сопротивление при выключении потока. Таким образом, в данной работе продемонстрировано, что графеновый слой может использоваться в качестве сенсорного покрытия, чувствительного к сдвиговым напряжениям в жидкости. Отметим также, что данная система должна быть чувствительна к наличию газовой фазы и может использоваться для анализа многофазных течений, так как очевидно, что покрытие будет чувствительно к составу окружающей среды.

**Оптическая модуляция терагерцового излучения на растягиваемых плёнках
одностенных углеродных нанотрубок**

В.В. Старченко¹, М.И. Пауков¹, Д.В. Красников², Ю.Г. Гладуш², С.С. Жуков,
Б.П. Горшунов¹, Г.А. Командин³, А.Г. Насибулин², А.В. Арсенин¹, В.С. Волков¹,
М.Г. Бурданова^{1,4}

¹Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет), Москва, Россия

²Сколковский институт науки и технологий, Москва, Россия

³Институт общей физики имени А.М. Прохорова РАН, Москва, Россия

⁴Институт физики твёрдого тела имени Ю.А. Осипьяна РАН, Черноголовка, Россия
starchenko.vv@mail.ru

DOI: 10.26902/Graphene-23-163

В данной работе изучались параметры модуляции терагерцового сигнала от прохождения через растягиваемые тонкие плёнки одностенных УНТ. Данное задача актуальна, поскольку существуют проекты разработки 6G-технологии, основанные на терагерцовой передаче сигнала. Ранее было показано, что низкоразмерные материалы, например, графен и углеродные нанотрубки (УНТ) [1] показывают высокие значения обоих параметров при оптической модуляции. Кроме того, углеродные нанотрубки на растягиваемой подложке рассматриваются как кандидат на использование в гибкой электронике [2]. Ранее одновременное использование двух способов контроля ТГц излучения – оптической и механической – не использовалось.

Исследуемые образцы представляли из себя плёнки нанотрубок, нанесённые на растягиваемую подложку Silpuran [1]. Их способность к модуляции изучалась методом спектроскопии оптической накачки - терагерцового зондирования. Для этого исследовалась зависимость фотопроводимости в зависимости от относительного удлинения плёнки и её толщины. В работе представлена интерпретация изменения параметров фотопроводимости в зависимости от растяжения. Полученные модуляторы имеют широкий диапазон глубины модуляции (от 5 до 100%) и малое время релаксации фотовозбуждённых носителей зарядов (порядка 10 пс). Данное исследование позволяет создавать устройства перестраиваемой оптоэлектроники перспективные в терагерцовых системах передачи информации.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (грант № 075-15-2022-1150)

[1] Burdanova M.G. et.al. // Carbon. 2021. V. 173. P. 245–252.

[2] Gilshteyn P. et. al.// ACS Appl.Mater. Interfaces. 2019. V. 11, № 30 P. 27327–27334.

**Влияние типа полимерной матрицы на морфологию и электрофизические свойства
теплостойких композитов с углеродными нанотрубками**А.А. Федоров^{1,2}, В.А. Кузнецов^{1,2}, Б.Ч. Холхоев³, В.Ф. Бурдуковский³¹*Институт неорганической химии им. А.В. Николаева СО РАН, пр. Академика
Лаврентьева, 3, Новосибирск, Россия*²*Новосибирский государственный технический университет, пр. К. Маркса, 20,
Новосибирск, Россия*³*Байкальский институт природопользования СО РАН, ул. Сахьяновой, 6,
г. Улан-Удэ, Россия**andrew_fedorov_1999@mail.ru***DOI: 10.26902/Graphene-23-164**

В рамках настоящей работы были синтезированы и исследованы электропроводящие полимерные композиционные материалы на основе матриц полибензимидазола и ароматического полиамида с одностенными углеродными нанотрубками (ОУНТ) с массовым содержанием нанотрубок от 0.1 до 5%. В качестве представителя полибензимидазолов был использован поли-2,2'-п-оксидифенилен-5,5'-добензимидазол (ОПБИ), в качестве представителя ароматических полиамидов—поли-м-фенилен-изофталамид (МПА). Были измерены и проанализированы температурные зависимости электросопротивления полученных серий композитов в диапазоне от 4.2 до 573 К. Показано, что в случае наименьших содержаний ОУНТ в композитах отжиг образцов при 573 К при давлении ниже 10^{-3} Па приводит к увеличению электросопротивления композита на основе матрицы ОПБИ в 500 раз и в 4 раза на основе матрицы МПА. Это обусловлено десорбцией кислорода с поверхности ОУНТ, выполняющего роль поверхностных акцепторных состояний. Разное увеличение электросопротивления обусловлено морфологией композитов – в случае ОПБИ-композитов ОУНТ находятся в объеме матрицы в виде отдельных нанотрубок, в то время как в МПА-матрице ОУНТ находятся в виде пучков.

Получение производных графена, модифицированных наночастицами благородных металлов, для задач газовой сенсорики

П.Д. Червякова¹, С.А. Рыжков¹, С.Д. Савельев¹, Г.А. Антонов¹, М.В. Байдакова, Д.Ю. Столярова², Д.А. Кириленко¹, С.И. Павлов¹, М. Бржежинская³, Р.Г. Чумаков², М.К. Рабчинский¹

¹Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе Российской академии наук, Санкт-Петербург, Россия

²НИЦ "Курчатовский институт", пл. Академика Курчатова, д. 1, Москва, Россия

³Helmholtz-Zentrum Berlin für Materialien und Energie, Hahn-Meitner-Platz 1, Берлин, Германия

Pchervyakova@mail.ioffe.ru

DOI: 10.26902/Graphene-23-165

Нанокompозиты на основе графена и металлических наночастиц (МН) являются перспективной основой для нового поколения газовых сенсоров и, в частности, газоаналитических мультисенсорных чипов для систем "Электронный нос". Однако, для активного применения таких материалов требуется преодоление проблемы агломерации наночастиц на поверхности графена как во время синтеза, так и в процессе эксплуатации. Решение проблемы способствует значительному улучшению газочувствительных свойств таких композитных структур [1].

В рамках данной работы была разработана методика синтеза композитов путем выращивания наночастиц благородных металлов (Ag, Pt, Pd, Au) на поверхности слоев функционализированных графенов. В основе методики лежит математическая модель расчета весовых соотношений функционализированных графенов и прекурсоров наночастиц с учетом их геометрических параметров для достижения желаемого размера и шага распределения последних. Синтез проводился в водно-спиртовой суспензии функционализированного графена и раствора солей благородных металлов. Образование наночастиц из ионов металлов обусловлено добавлением восстановителя.

Исследование полученных нанокompозитов методами порошковой дифракции и электронной микроскопии позволило установить, что присутствие функциональных групп на поверхности графена позволило добиться равномерного распределения наночастиц Ag, Pt, Pd, Au с размерами 20–50 нм, а также усилило энергию адсорбции МН. Последний факт подтверждается сохранением морфологии наночастиц после отжига до $T = 350$ °С, обычно приводящему к агрегации наночастиц. Последующий анализ хеморезистивных свойств полученных нанокompозитов показал, что данные материалы обладают высокой чувствительностью и селективностью детектирования различных газов и летучих органических соединений. Установлено, что предел обнаружения составляет менее 5 ppm при отсутствии необходимости нагрева во время эксплуатации, что выгодно отличает данные материалы от классических полупроводниковых метал-оксидных сенсоров.

[1] Cui S., Mao S., Wen Z. et al. // *Analyst*. 2013. V. 138, № 10. P.2877-2882.

Высокоэффективные катализаторы для синтеза углеродных нановолокон
 Д.М. Шивцов¹, А.А. Попов², А.Д. Варыгин², Ю.И. Бауман¹, А.Р. Потылицына¹,
 С.Д. Афонникова¹, Мишаков И.В.¹, Ю.В. Шубин²

¹Институт катализа им. Г.К. Борескова СО РАН, пр. Академика Лаврентьева, 5,
 Новосибирск, Россия

²Институт неорганической химии им. А.В. Николаева СО РАН, пр. Академика
 Лаврентьева, 3, Новосибирск, Россия
 danil@catalysis.ru

DOI: 10.26902/Graphene-23-166

В настоящее время развитию каталитических технологий утилизации лёгких углеводородов (попутный нефтяной газ, ПНГ) и хлорорганических отходов (отходы производства трихлорэтилена) уделяется особое внимание. Разработка эффективных способов их переработки позволит отказаться от использования неэкономичных методов некаталитического сжигания, приводящих к загрязнению окружающей среды [1]. Один из подходов утилизации лёгких углеводородов C₁-C₆ (в том числе, хлорзамещённых) основан на их каталитическом пиролизе, в результате которого образуются углеродные нановолокна (УНВ) с высокими значениями удельной площади поверхности и развитой пористой структурой [2–4]. Среди многообразия катализаторов пиролиза особо выделяются сплавные системы на основе никеля. Особый интерес в этом отношении представляет использование пористых сплавов Ni-M, которые в ходе контакта с реакционным газом подвергаются быстрой углеродной эрозии с формированием высокопроизводительных катализаторов [2–4].

В настоящей работе с применением метода восстановительного термолиза многокомпонентных предшественников была синтезирована серия биметаллических сплавов Ni_{1-x}M_x (M = In, Sn) с различным стехиометрическим соотношением компонентов [3]. Содержание второго металла (M) варьировали в интервале 0.25–25 ат.%. Фазовый состав и микроструктура Ni_{1-x}M_x сплавов была изучена методами РФА и СЭМ. Полученные образцы сплавов были испытаны в реакции каталитического пиролиза модельных смесей на основе этилена, углеводородов C₂-C₄, а также смеси трихлорэтилена с водородом (C₂HCl₃/H₂). В результате углеродной эрозии сплавов наблюдалось формирование субмикронных каталитических частиц, выступающих в роли центров роста УНВ. В докладе будет рассмотрено влияние состава сплава Ni_{1-x}M_x на его производительность по отношению к углеродному продукту. Показано, что системы с малой добавкой M (1 ат.% и менее) обладают чрезвычайно высокой каталитической активностью, обеспечивающей выход УНВ в количестве 200 г/г_{кат} и более за 60 минут реакции. Морфологические и структурные особенности полученных углеродных нановолокон были охарактеризованы набором физико-химических методов анализа: СЭМ, ПЭМ, РФА, низкотемпературная адсорбция азота.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ (грант №21-13-00414).

[1] Щерба В.А., Гомес А.Ш.С., Воробьев К.А. //Проблемы региональной экологии. 2019. № 1. С. 139-144.

[2] Мишаков И.В., Афонникова С.Д., Бауман Ю.И. и др. //Кин. и кат. 2022. Т. 63, № 1. С. 110-121.

[3] Popov A.A., Shubin Y.V., Bauman Y.I. et al. //Nanotechnology. 2020. V. 31, № 49. P. 495604.

[4] Potylitsyna A.R., Rudneva Y.V., Bauman Y.I. et al. //Materials. 2023. V.16, № 2. P. 845.

Научное издание

**Четвертая российская конференция
«ГРАФЕН: МОЛЕКУЛА И 2D-КРИСТАЛЛ»**

Сборник тезисов докладов

14–18 августа 2023 года

Ответственный за выпуск
д.ф.-м.н., проф. ОКОТРУБ Александр Владимирович

Техническое редактирование и верстка
Небогатикова Н.А., Ворфоломеева А.А.
Федосеева Ю.В., Миронова Г.Н.

Подписано к печати и в свет 07.07.2023.
Формат 60×84/8.
Гарнитура «Times New Roman». Печ. л. 21,7. Уч.-изд. л. 21,2.
Тираж 170 экз. Заказ № 106.

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки
Институт неорганической химии им. А.В. Николаева Сибирского отделения РАН.
Просп. Акад. Лаврентьева, 3, Новосибирск, 630090.