

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 химии твердого тела и механохимии СО РАН

ПЯТАЯ РОССИЙСКАЯ КОНФЕРЕНЦИЯ
ГРАФЕН
МОЛЕКУЛА И 2D КРИСТАЛЛ

г. Новосибирск 11–15 августа 2025 г.

N *Новосибирский
государственный
университет
*НАСТОЯЩАЯ НАУКА

imc
INDUSTRIAL MONITORING
AND CONTROL

 **GRAPHENE
VALLEY**
corporation

 **ЦНФМ**
РАЗРАБОТКА · МОДЕЛИРОВАНИЕ · ВНЕДРЕНИЕ





Уважаемые коллеги!

Благодарим Вас за проявленный интерес к Пятой 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 учёных в решении современных проблем материаловедения и привлечению молодых исследователей для решения актуальных научных задач.

Оргкомитет выражает особую благодарность Новосибирскому государственному университету, центру компетенций НТИ «Технологии моделирования и разработки новых функциональных материалов с заданными свойствами», компании «Группа Ай-Эм-Си» и корпорации «Графеновая Долина» за финансовую поддержку.

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

Оргкомитет Конференции



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 химии твердого тела и механохимии
Сибирского отделения Российской академии наук

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

Сборник тезисов докладов

11–15 августа 2025 года

Новосибирск, 2025

УДК 546.26+546.052+546.22

Тезисы докладов Пятой российской конференции «Графен: молекула и 2D-кристалл» / Ответственный за выпуск А.В. Окотруб. Новосибирск: ИНХ СО РАН, 2025, 144 с.

Сборник содержит доклады Пятой российской конференции «Графен: молекула и 2D-кристалл», которая проводилась 11–15 августа 2025 года в Новосибирске.

В сборнике представлены доклады по направлениям: развитие методов синтеза гибридных и композитных материалов на основе графена, углеродных нанотрубок, дихалькогенидов переходных металлов и других родственных структур; диагностика графена и других низкоразмерных материалов методами электронной микроскопии, рентгеновской и оптической спектроскопии; теория, строение и моделирование свойств графена и других низкоразмерных материалов и устройств на их основе; оптические, магнитные и другие электронные свойства графена и родственных материалов, их приложения в микроэлектронике; физико-химические свойства графена и других низкоразмерных материалов и их приложение в электрохимии, катализе и др.

ISBN 978-5-90168-855-7

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 химии твердого тела и механохимии СО РАН

ПРОГРАММНЫЙ КОМИТЕТ

Федорук М.П., академик РАН, НГУ, Новосибирск

Бухтияров В.И., академик РАН, ИК СО РАН, Новосибирск

Латышев А.В., академик РАН, ИФП СО РАН, Новосибирск

Федин В.П., академик РАН, ИНХ СО РАН, Новосибирск

Немудрый А.П., чл.-корр. РАН, ИХТТМ СО РАН, Новосибирск

Брылев К.А., д.х.н., профессор РАН, ИНХ СО РАН, Новосибирск

Насибулин А.Г., д.т.н., профессор, Сколтех, Москва

Максименко С.А., д.ф.-м.н., профессор, БГУ, Минск

Чернозатонский Л.А., д.ф.-м.н., профессор, ИБХФ РАН, Москва

Осипов В.А., д.ф.-м.н., ОИЯИ, Дубна

Образцова Е.Д., к.ф.-м.н., ИОФ РАН, Москва

ПРЕДСЕДАТЕЛЬ КОНФЕРЕНЦИИ

Окотруб А.В., д.ф.-м.н., профессор, ИНХ СО РАН, Новосибирск

ЗАМЕСТИТЕЛИ ПРЕДСЕДАТЕЛЯ

Антонова И.В., д.ф.-м.н. ИФП СО РАН, Новосибирск

Кузнецов В.Л., к.х.н., ИК СО РАН, Новосибирск

СЕКРЕТАРИАТ КОНФЕРЕНЦИИ

Ворфоломеева А.А., к.х.н., ИНХ СО РАН, Новосибирск

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

Получение, исследование и применение пленок двумерных материалов MoS₂, WS₂А.Б. Логинов, М.М. Куватов, Р.Р. Исмагилов, В.И. Клещ, А.Н. Образцов*МГУ им. М.В. Ломоносова, Ленинские горы 1-2, Москва, Россия**obraz@polly.phys.msu.ru***DOI: 10.26902/Graphene-25-001**

Двумерные дихалькогениды переходных металлов (ДПМ) привлекают внимание из-за своих свойств, перспективных для многочисленных приложений. В данной работе для получения покрытий из дисульфидов молибдена и вольфрама предложена оригинальная модификация метода химическое осаждение из газовой фазы (CVD) [1]. В качестве прекурсоров использовались газообразный сероводород и термически испаренный молибден или вольфрам. В качестве подложек использовались пластины чистого и окисленного кремния, кварц, керамика, слюда и другие материалы. В ходе исследований были выявлены зависимости структурно-морфологических свойств и состава осаждаемого материала от температуры подложки, длительности осаждения и других параметров. Выявлены стадии формирования кристаллических ДПМ от зарождения и роста планарных кристаллитов до формирования мезопористых слоев, состоящие из тонких кристаллитов, ориентированных перпендикулярно подложке [3]. Сравнительное исследование фотолюминесценции выявило взаимосвязь морфологии пленок с проявлением экситонных и трионных состояний. Полученные пленки ДПМ использовались для создания сенсоров состава окружающей газовой среды (на примере H₂O и NH₃) [3].

Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ (грант № 25-12-00068).

[1] Loginov A.B. *et al.* // Phys. Status Solidi B. 2022. V. 260. P. 2200481.

[2] Loginov A.B. *et al.* // Nanotechnology. 2024. V. 35. P. 415601.

[3] Loginov A.B. *et al.* // Vestn. Mosk. Univ., Ser. 3: Fiz. Astron. 2025. V. 80. № 2. P. 2520501.

Взаимодействие структурированного света с двумерными системами

С.А. Тарасенко

*ФТИ им. А.Ф. Иоффе, ул. Политехническая 26, Санкт-Петербург, Россия**tarasenko@coherent.ioffe.ru***DOI: 10.26902/Graphene-25-002**

Структурированный свет, примером которого являются векторные пучки, состоящие из когерентных электромагнитных волн с различной поляризацией, или закрученные оптические пучки, несущие орбитальный угловой момент, имеет большой потенциал для использования в оптике и оптоэлектронике [1,2].

В докладе обсуждается взаимодействие структурированного света с двумерными электронными системами, такими как графен, монослой дихалькогенидов переходных металлов и другие двумерные кристаллы, квантовые ямы. Исследован отклик двумерных систем на структурированное излучение. Показано, что структурированное излучение генерирует постоянные токи и токи на удвоенной частоте, даже если двумерная система однородна и изотропна [3,4]. В отличие от традиционных фотогальванических эффектов и эффектов генерации второй гармоники, изучаемые токи обусловлены не отсутствием центра инверсии в среде, а пространственной неоднородностью самого электромагнитного поля. Возникающие токи могут быть связаны с пространственными градиентами интенсивности, градиентами поляризационных параметров Стокса или фазы электромагнитного поля в плоскости двумерного электронного газа.

Обсуждается физика взаимодействия неоднородного электромагнитного поля с носителями заряда в двумерных системах, механизмы генерации фототоков структурированным светом для различных спектральных диапазонов. Разработана микроскопическая теория нелинейного нелокального транспорта электронов, получены аналитические выражения для различных вкладов в фототок. Развитая теория применена для описания токов, индуцированных закрученными оптическими пучками. Фототоки, индуцированные закрученным светом, имеют радиальную и азимутальную (вихреподобную) компоненты, пространственные распределения которых зависят от поляризации и углового момента пучка.

Структурированное излучение раздвигает границы нелинейной оптики за рамки ограничений, налагаемых симметрией кристаллической решетки.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант № 22-12-00211-П).

[1] Forbes A., de Oliveira M., Dennis M.R. // Nat. Photonics. 2021. V. 15. P. 253.

[2] Knyazev B.A., Serbo V.G. // Phys. Usp. 2018. V. 61. P. 449.

[3] Gunyaga A.A., Durnev M.V., Tarasenko S.A. // Phys. Rev. B. 2023. V. 108. P. 115402.

[4] Gunyaga A.A., Durnev M.V., Tarasenko S.A. // Phys. Rev. Lett. 2025. V. 134. P. 156901.

**Многофункциональные нанокомпозитные материалы
на основе однослойных углеродных нанотрубок**

А.Г. Насибулин, Х.А. Батт, С.П. Шадров, Д.В. Красников

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

A.Nasibulin@skol.tech

DOI: 10.26902/Graphene-25-003

Однослойные углеродные нанотрубки (ОУНТ) зарекомендовали себя как перспективная добавка для улучшения ряда свойств полимерных матриц [1]. Высокие значения отношения длины к диаметру, позволяют превосходить все известные материалы [2,3]. При этом показано, что порог перколяции для ОУНТ достигается уже при ~0,001% (масс.) [4,5]. Сочетание низкого значения порога перколяции и высокого аспектного соотношения ОУНТ позволяет создавать на их основе материалы с более высокой электропроводностью по сравнению с многослойными углеродными нанотрубками при одинаковом содержании углерода [4,6]. Помимо увеличения электропроводности термопластичных и термореактивных полимерных систем, введение ОУНТ также способствует повышению теплопроводности и улучшению прочностных и адгезионных характеристик. Улучшение механических характеристик получаемых материалов обусловлены сочетанием высокого модуля упругости вводимых ОУНТ, их прочностью на разрыв, высокой совместимостью с различными полимерами, а также подавлением стандартных механизмов разрушения в полимерной матрице. Свойства ОУНТ используются для создания высокочувствительных, умных и самодиагностирующихся материалов. При этом заявленные коэффициенты чувствительности достигают ~20 для термореактивных и ~80 для термопластичных матриц, соответственно [5,7]. Данная работа направлена на освещение различных механизмов, лежащих в основе мультифункционального улучшения свойств полимерных матриц при введении ОУНТ, а также на обсуждение перспектив их дальнейшего применения.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант № 22-13-00436 (П))

- [1] Predtechenskiy M.R. *et al.* // Carbon Trends. 2022. V. 8. P. 100175.
- [2] Predtechenskiy M.R. *et al.* // Carbon Trends. 2022. V. 8. P. 100176.
- [3] Butt H.A. *et al.* // Carbon. 2023. V. 202. P. 450-463.
- [4] Butt H.A. *et al.* // Compos. Struct. 2021. V. 259. P. 113244.
- [5] Novikov I.V. *et al.* // ACS Appl. Mater. Interfaces. 2022. V. 14. P. 18866-18876.
- [6] Butt H.A. *et al.* // Proc. 2021 IEEE 21st Int. Conf. Nanotechnol. (NANO). 2021. P. 417-420.
- [7] Butt H.A. *et al.* // Carbon. 2025. V. 240. P. 120368.

Синтез и исследование углеродных 1D материалов, декорированных палладием, для обратимых процессов синтеза и разложения муравьиной кислоты

О.Ю. Подъячева

Институт катализа СО РАН, просп. Акад. Лаврентьева 5, Новосибирск, Россия
pod@catalysis.ru

DOI: 10.26902/Graphene-25-004

В настоящее время углекислый газ рассматривается в качестве перспективного сырья, из которого можно получать востребованные продукты. С помощью реакции гидрирования CO_2 , используя определенные катализаторы и условия проведения реакции, можно успешно синтезировать широкий набор ценных продуктов, таких как метан, CO , спирты, кислоты, альдегиды и т.д. Одним из таких ценных продуктов является муравьиная кислота (МК), которая широко используется в сельском хозяйстве, текстильной промышленности и медицине. Актуальность процесса получения МК из CO_2 усиливается появившимися недавно сведениями о возможности реализации с помощью CO_2 цикла химического накопления водорода, включающего стадии образования и разложения муравьиной кислоты на одном и том же катализаторе в различных условиях [1,2].

В работе представлены результаты по синтезу и исследованию углеродных 1D материалов, декорированных палладием, для обратимых процессов гидрирования CO_2 в МК при высоком давлении и разложения МК на H_2 и CO_2 при атмосферном давлении. В качестве углеродных 1D материалов использованы многостенные углеродные нанотрубки (МУНТ) и азотсодержащие углеродные нанотрубки (N-УНТ), полученные методом CCVD.

Проведено исследование Pd/МУНТ и Pd/N-УНТ в реакции гидрирования CO_2 в МК. Установлено влияние температуры процесса (100-150°C), общего давления в системе (20-60 атм), относительного давления водорода и загрузки катализатора на выход МК. Получен максимальный выход МК 27.6 г/г_{Pd} с селективностью по МК 98% при 150°C и давлении 60 атм.

Установлены закономерности протекания реакции разложения коммерческой и биогенной МК на Pd/МУНТ и Pd/N-УНТ катализаторах в жидкой фазе. Показано, что сочетание оптимальных параметров реакции (среда, загрузка катализатора, концентрация МК, использование определенных добавок) позволяет увеличить скорость реакции в единицах TOF с 0.056 до 0.53 с⁻¹ при 50°C. Установлено влияние различных примесей в биогенной МК на протекание каталитической реакции разложения. Предложены решения для увеличения скорости реакции разложения биогенной МК.

Комплексом физико-химических методов исследована устойчивость углеродных 1D материалов, декорированных палладием, в реакциях получения и разложения МК.

Продемонстрирована принципиальная возможность использования синтезированных 1D углеродных материалов, декорированных палладием, для процесса накопления водорода с помощью CO_2 .

Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ (грант № 25-23-00090).

[1] Wang Z. *et al.* // Catalysts. 2023. V. 13. P. 1168.

[2] Asefa T., Koh K., Yoon C.W. // Adv. Energy Mater. 2019. V. 9. № 30. P. 1901158.

Сравнительное исследование коммерческих многослойных углеродных нанотрубок
В.Л. Кузнецов¹, С.И. Мосеенков¹, Г.В. Голубцов¹, А.В. Заворин¹, А.Ю. Скуратов²,
Д.С. Чебоचाков², С.В. Чупин²

¹Институт катализа СО РАН, просп. Акад. Лаврентьева 5, Новосибирск, Россия

²Новосибирский государственный университет, ул. Пирогова 1, Новосибирск, Россия
kuznet@catalysis.ru

DOI: 10.26902/Graphene-25-005

Открытие углеродных нанотрубок (УНТ) и осознание их уникальных механических, термических и электрических свойств, которые намного превосходят свойства обычных инженерных материалов, инициировало исследования возможностей их использования в различных областях науки и техники, что в конечном итоге привело к разработке широкого ряда материалов на их основе. В настоящее время УНТ являются одним из перспективных модификаторов для производства композиционных конструкционных и функциональных материалов на основе полимерных, металлических и керамических матриц, резин, различных электрохимических устройств, сенсоров, адсорбентов, катализаторов и др. материалов.

Первые производства многослойных УНТ (МУНТ) появились в начале 2000-х, так, в 2004 г было известно более 50 производителей, которые могли синтезировать до 70 тонн трубок в год. Широкомасштабное промышленное производство МУНТ появилось в 2007-2008 гг. (Bayer MaterialScience, Nanocyl, Archema). К 2025 году мировое производство достигло уже 21 тыс. тонн, что определяется высоким уровнем их практического использования. Потребительские свойства УНТ в значительной степени зависят от множества параметров, таких как: распределение по диаметру, дефектность, морфология первичных продуктов. Особое внимание уделяется их качеству, в частности, наличию металлических и углеродистых примесей, а также однородности и структурной целостности. Появилось понимание, что для различных приложений необходимы УНТ с определенными характеристиками. Наиболее быстрое развитие рынка МУНТ связано с их использованием в металл-ионных аккумуляторах, в композиционных материалах, а также с использованием МУНТ в аэрокосмической области. Потребление МУНТ быстро растет, и к 2030 г. прогнозируемый уровень их производства достигнет 40-60 тыс тонн в год [1,2].

В докладе мы представляем сравнительные характеристики репрезентативного набора коммерческих МУНТ, производимых рядом ведущих компаний, а также МУНТ, получаемых в Институте катализа СО РАН. В качестве методов контроля и охарактеризования нанотрубок были использованы просвечивающая электронная микроскопия в сочетании с энергодисперсионной спектроскопией, растровая электронная микроскопия, рентгенофазовый анализ, спектроскопия комбинационного рассеяния, низкотемпературная адсорбция азота, гелиевой пикнометрии и др. Данный набор методов позволил получить исчерпывающую информацию о структуре, морфологии, дефектности и чистоте МУНТ, на которые существенно влияют технологические параметры их производства, такие как размер и состав частиц катализатора, условия его активации, природа углеродного сырья, температура, газовые потоки, конструкция реактора и др.

В докладе будут также представлены сравнительные характеристики композиционных материалов, полученных с использованием коммерческих МУНТ, в том числе с использованием нанотрубок ИК СО РАН. Обсуждаются параметры МУНТ, влияющие на эффективность их использования в ряде важных практических приложений.

Работа выполнена в рамках проекта «Создание опытной технологической линии для производства катализаторов и многослойных углеродных нанотрубок (МУНТ) и разработка модифицированных материалов с применением углеродных наноаддитивов» при финансовой поддержке фонда НТИ.

[1] <https://www.nanotechmag.com/the-global-market-for-multi-walled-carbon-nanotubes-mwcnt-2023-2033-2/>.

[2] <https://www.precedenceresearch.com/carbon-nanotubes-market>.

Оптические свойства электронного текстиля, содержащего углеродные точки

С.А. Смагулова, М. Н. Егорова, З.И. Евсеев

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

ул. Белинского 58, Якутск, Россия

smagulova@mail.ru

DOI: 10.26902/Graphene-25-006

Исследование оптических свойств электронного текстиля представляет значительный научный и практический интерес. В настоящее время оптические свойства таких материалов изучены недостаточно полно, что ограничивает их применение в области оптоэлектроники. Основное влияние на оптические свойства электронного текстиля оказывает оксид графена (ОГ), который является ключевым компонентом таких материалов. Однако особый интерес вызывает исследование электронного текстиля, модифицированного углеродными точками.

В данной работе созданы электронные текстили с использованием ОГ, синтезированном методом Хаммерса и слабо ОГ (СОГ), полученного электрохимическим расщеплением графита. Исследованы оптические свойства электронных текстилей, содержащих углеродные точки и композит на основе поливинилового спирта. Обнаружено, что электронные текстили, созданные на основе ОГ и СОГ, характеризуется равномерным поглощением в диапазоне 200–500 нм, а также проявляют люминесценцию с максимумом интенсивности при 443 нм. Введение углеродных точек в состав электронных текстилей приводит к увеличению интенсивности поглощения, однако сопровождается снижением интенсивности люминесценции в ~5 раз для электронного текстиля с ОГ, и в ~2 раза для электронного текстиля с СОГ. Добавление композита на основе поливинилового спирта и углеродных точек в исходный текстиль приводит к появлению люминесценции в красной области спектра с максимумом интенсивности при 588 нм. Этот результат показал возможность модификации исходного текстиля различными композитами, содержащими углеродные точки, для получения новых оптических свойств. Полученные результаты свидетельствуют о сильном взаимодействии углеродных точек с электронным текстилем, что открывает перспективы для создания функциональных текстильных материалов с заданными оптическими характеристиками, которые могут быть использованы в умной одежде, сенсорах и системах визуализации.

Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ (грант № 24-22-20035).

Микроволновой синтез сорбентов на основе графена, демпированного кислород и азот-содержащими группами

А.И. Сапрыкин^{1,2}, Н.С. Медведев^{1,2}, В.Г. Макотченко¹,
А.О. Фролова^{1,2}, В.Д. Курбатова^{1,2}

¹*Институт неорганической химии им. А.В. Николаева СО РАН,
просп. Акад. Лаврентьева 3, Новосибирск, Россия*

²*Новосибирский государственный университет, ул. Пирогова 1, Новосибирск, Россия
medvedev@niic.nsc.ru*

DOI: 10.26902/Graphene-25-007

В настоящее время происходит значительный рост интереса к редким и редкоземельным элементам (РЗЭ), обусловленный стабильно возрастающим спросом со стороны высокотехнологичных отраслей промышленности. Производство и добыча РЗЭ неразрывно связано с возможностью получения полной информации об их содержании в составе анализируемых проб. Наиболее информативные методы анализа: масс-спектрометрия и атомно-эмиссионная спектрометрия с индуктивно связанной плазмой (ИСП-МС и ИСП-АЭС). Необходимую чувствительность обеспечивают методики с предварительным концентрированием. Одним из наиболее эффективных способов концентрирования является сорбционное концентрирование. Сорбционные материалы на основе оксида графита и графена, полученного методом микроволновой эксфолиации фторидов и бромидов диуглерода, интеркалированных ацетоном, миламином и ацетонитрилом содержат кислород и азот функциональные группы. Опыт показывает, что полученные сорбционные материалы обладают высокой сорбционной емкостью, что обеспечат эффективное извлечение редких и РЗЭ из растворов. Применение сорбционных материалов для концентрирования РЗЭ обеспечит возможность существенного снижения пределов обнаружения (ПО) аналитов при ИСП-МС и ИСП-АЭС анализе с предварительным сорбционным концентрированием, что даст возможность получения наиболее полной информации о химическом составе анализируемых проб, включая определение РЗЭ и благородных металлов.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ (грант № РФФ 25-23-00245).

**Оптическая спектроскопия графеноподобных материалов
за дифракционным пределом**

А.Г. Милёхин¹, I.A. Milekhin^{1,2}, Н.Н. Курусь¹, А.В. Тараненко¹, Э.О. Чиглинцев^{3,4},
А.И. Чернов³, А.В. Латышев^{1,2}, D.R.T. Zahn⁵

¹*Институт физики полупроводников им. А.В.Ржанова СО РАН,
просп. Акад. Лаврентьева 13, Новосибирск, Россия*

²*Новосибирский государственный университет, ул. Пирогова 1, Новосибирск, Россия*

³*Московский физико-технический институт, Институтский переулок 9 стр.1,
Долгопрудный, Россия*

⁴*Российский квантовый центр, Сколково, Большой бульвар д. 30, стр. 1, Москва, Россия*

⁵*Semiconductor Physics, Chemnitz University of Technology D-09107, Chemnitz, Germany
milekhin@isp.nsc.ru*

DOI: 10.26902/Graphene-25-008

Ближнепольная оптическая спектроскопия, или наноскопия, включая плазмон-усиленные комбинационное рассеяние света (нано-КРС) и фотoluminesценцию (нано-ФЛ), основана на усилении оптического сигнала от наноструктур, находящихся в поле локализованного поверхностного плазмона металлизированного зонда атомно-силового микроскопа, и позволяет получать детальную информацию о фононном и электронном спектре графеноподобных материалов с пространственным разрешением много меньше дифракционного предела.

В докладе обсуждаются результаты изучения локальных свойств пленок мультиграфена, графена и двумерных островков дихалькогенидов металлов на основе анализа их спектров нано-КРС и нано-ФЛ.

Отдельное внимание будет уделено развиваемому методу нано-КРС и нано-ФЛ в режиме «щелевого» плазмона (от англ. «gap-mode tip-enhanced Raman scattering (gap=mode TERS)»). В этом случае графеноподобные пленки помещаются на плазмонную подложку, что позволяет реализовать значительное увеличение оптического отклика до 10^8 раз. На основе анализа спектров нано-КРС могут быть определены не только размеры и форма наноструктур, но и разнообразные структурные дефекты, и возникающие в них локальные механические напряжения с пространственным разрешением порядка нанометра.

Обсуждаются перспективы использования методов наноскопии для изучения отдельных полупроводниковых наноструктур.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ (грант № 22-12-00302).

Топологические фазовые переходы между состояниями топологического изолятора, Вейлевского и Дираковского полуметаллов в АФМ и ФМ $\text{Mn}(\text{Fe})_{1-x}\text{Ge}_x\text{Bi}_2\text{Te}_{4-y}\text{Se}_y$ и характерные изменения электронной и спиновой структуры

А.М. Шикин

*Санкт-Петербургский государственный университет,
Университетская набережная 9, Санкт-Петербург, Россия
ashikin@inbox.ru*

DOI: 10.26902/Graphene-25-009

В докладе будут представлены и проанализированы результаты теоретических расчетов и экспериментальных исследований изменений электронной и спиновой структуры (дисперсионных зависимостей) при топологических фазовых переходах (ТФП), происходящих в топологическом изоляторе (ТИ) MnBi_2Te_4 , от исходного состояния антиферромагнитного топологического изолятора (АФМ) в состояние Дираковского и Вейлевского полуметалла, а также состояние тривиального изолятора - путем постепенной замены магнитных атомов Mn на атомы немагнитного элемента Ge и другого магнитного металла Fe, а также при замещении атомов Bi на атомы более легкого элемента Se. Будут проанализированы условия формирования фазы Вейлевского полуметалла при модуляции величин эффективного спин-орбитального взаимодействия (СОВ) и обменного взаимодействия, а также в процессах продольного сжатия и расширения кристаллической решетки ТИ $\text{Mn}_{1-x}\text{Ge}_x\text{Bi}_2\text{Te}_4$. Анализ будет производиться на основе сравнения особенностей экспериментально измеренных фотоэмиссионных спектров с высоким энергетическим и угловым разрешением и теоретических расчетов электронной структуры и спиновой структуры объемных и топологических поверхностных состояний и ближайших состояний валентной и зоны проводимости и их изменений при ТФП в исследуемых системах, проведенных методом теории функционала плотности. Проведенные расчеты показали возможность реализации в изучаемой системе серии топологических фазовых переходов – из состояния ТИ в состояние тривиального изолятора - (i) через состояние Дираковского полуметалла для АФМ фазы и (ii) для ФМ фазы – через серию фазовых состояний «Дираковский полуметалл - Вейлевский полуметалл - Дираковский полуметалл». Показано формирования Вейлевских точек в ГЗ направлении для ФМ фазы и их аннигиляция при изменении величины СОВ и модуляции межатомных расстояний с переходом в фазу топологического и тривиального изолятора. Дополнительно будут представлены модельные расчеты влияния изменений локального магнитного упорядочения в $\text{Mn}_{1-x}\text{Ge}_x\text{Bi}_2\text{Te}_4$ от АФМ к локальному ферромагнитному упорядочению при замещении атомов Mn на атомы Ge через слой, которые показали возможность формирования состояния магнитного Вейлевского полуметалла в данной системе при концентрациях Ge порядка 40% без внешнего перемангничивания. Будет проанализирована возможность оптимизации Вейлевской фазы при модуляции величины магнитного момента на магнитных атомах и эффективного СОВ в системе и соответствующих Mn/Fe и Te/Sb замещений.

Работа выполнена в рамках гранта РНФ (№ 23-12-00016).

Особенности дифракционных исследований углеродных материалов

С.В. Цыбуля^{1,2}, С.В.Черепанова¹, Д.А. Яценко^{1,2}

¹Институт катализа им. Г.К.Борескова СО РАН,
просп. Акад. Лаврентьева 5, Новосибирск, Россия

²Новосибирский государственный университет, ул. Пирогова 1, Новосибирск, Россия
tsybulya@catalysis.ru

DOI: 10.26902/Graphene-25-010

Рассмотрены особенности дифракционных исследований многослойных графеновых структур и массивов однослойных нанотрубок, а также методические вопросы корректной интерпретации дифракционных данных для углеродных материалов.

Многослойный графен – турбостратная структура с произвольным вектором смещения графеновых сеток при их наложении друг на друга, характеризуется специфической «зубообразной» формой дифракционных пиков $hk0$. Дифракционные картины от подобных графеновых пакетов могут быть рассчитаны на основе статистической модели одномерно разупорядоченных структур [1].

Массивы одностенных углеродных нанотрубок зачастую представляют собой регулярную упаковку трубок (2D периодическую наноструктуру), что приводит к появлению дифракционных пиков в области малых углов. Анализ положения и формы этих пиков позволяет установить средний диаметр нанотрубок и построить функцию распределения по диаметрам [2].

Многочисленные ошибки в определении так называемой степени графитизации углеродных материалов связаны с некорректной оценкой положения дифракционного пика 002 из-за пренебрежения поправками на геометрию съемки и глубину проникновения рентгеновских лучей в исследуемые пробы.

Работа выполнена в рамках НИОКР Минобрнауки России, FWUR-2024-0032

[1] Cherepanova S.V., Tsybulya S.V. // Mater. Sci. Forum. 2004. V. 443. № 4. P. 87.

[2] Yatsenko D.A., Salamatov I.N., Bulavchenko O.A., Tsybulya S.V. // Appl. Phys. A: Mater. Sci. Process. 2024. V. 130. № 11. P. 838.

Терагерцовые свойства допированного азотом графена

**Н.И. Волынец¹, Г.В. Горохов¹, Ю.В. Федосеева², Н.Н. Дубинецкий¹, И.Н. Громов¹,
А.Д. Федоренко², А.В. Окотруб², К.Г. Батраков¹**

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

²Институт неорганической химии им. А. В. Николаева СО РАН,
просп. Акад. Лаврентьева 3, Новосибирск, Россия
nadezhda.volynets@gmail.com

DOI: 10.26902/Graphene-25-011

Уникальные физические параметры графена, в частности рекордная электропроводность и значительный баллистический пробег носителей заряда, делают его перспективным материалом для применений в терагерцовом (ТГц) диапазоне частот [1]. Однако, ввиду симметрии кристаллической решетки, графен является бесщелевым немагнитным полуметаллом, что снижает его пригодность для решения ряда технологических задач. Известно, что допирование представляет собой эффективный метод управления электронными свойствами полупроводников, применимый и для модификации зонной структуры графена [2]. Однако, функционализация графена может отрицательно сказаться на его электродинамических свойствах, от которых, в свою очередь, зависят поглощение и экранирование графеном электромагнитного излучения, также необходимые для большого числа применений.

В работе исследуется влияние допирования атомами азота на электропроводность графена. Графен был синтезирован методом химического осаждения из газовой фазы при атмосферном давлении. Модификация графена атомами азота проводилась ионно-плазменным методом при ускоряющем напряжении 3 кВ и токе ионов порядка 20 мА. Время обработки графена составляло 10, 20, 30, 60, 120, 300 и 600 секунд для определения влияния допирования на коэффициент пропускания графена в ТГц диапазоне. Спектроскопия комбинационного рассеяния света показала образование дефектной моды в графене после его обработки плазмой. Рентгеновские фотоэлектронные спектры N 1s содержат три основных компонента, соответствующие пиридиновому азоту при 399.0 эВ, пирольному или пиразольному при 400.1 эВ, а также графитовому азоту при 401.5 эВ, причём первые два состояния азота являются доминирующими. Показано, что увеличение времени обработки графена азотной плазмой приводит к росту концентрации азота в образце, при этом соотношение форм азота не меняется.

Коэффициент пропускания графена в диапазоне 0.1 – 1 ТГц увеличивается после обработки азотной плазмой, при этом увеличение длительности обработки приводит к дальнейшему его росту. Это можно объяснить возрастанием столкновительного уширения, связанного как с допированием графена атомами азота, так и с возникновением дополнительных дефектов решётки графена вследствие плазменной обработки.

Работа выполнена при финансовой поддержке БРФФИ Ф23УЗБ-036.

[1] Novoselov K. *et al.* // Nature. 2012. V. 490. P. 192.

[2] Stergiou A. *et al.* // Prog. Mater. Sci. 2020. V. 114. P. 100683.

Свойства и области применения графеновых частиц, синтезированных в плазме**М.Б. Шавелкина¹, И.В. Антонова^{2,3}, А.И. Иванов²**¹ *Объединенный институт высоких температур РАН,
ул. Ижорская 13 стр. 2, Москва, Россия*² *Институт физики полупроводников им. А.В. Ржанова СО РАН,
просп. Акад. Лаврентьева 13, Новосибирск, Россия*³ *Новосибирский государственный технический университет,
просп. К. Маркса 20, Новосибирск, Россия
mshavelkina@gmail.com***DOI: 10.26902/Graphene-25-012**

Возможность реализации потенциала углеродных наноструктур стимулировала развитие методов их синтеза. Наибольшее распространение получил метод химического осаждения из паровой фазы (CVD-метод) и химическое или физическое расслоение ВОПГ. Несмотря на простой подход, эти методы не позволяют получать графен с воспроизводимыми свойствами. Поэтому получение наноструктур с заданными свойствами и в промышленных количествах является одним из актуальных направлений исследований. Применение плазменных технологий позволяет проводить химические процессы без применения подложек, катализаторов, растворителей или кислот, что обеспечивает высокую чистоту продуктов синтеза и, во-вторых, процесс синтеза является одностадийным, так как протекает в экстремальных условиях. Синтезированный в плазменном потоке, генерируемом плазмотроном постоянного тока при пониженном давлении, графен обладает высокой степенью кристалличности, числом слоев от 2 до 5, высокой подвижностью электронов. Варьируя род и расход плазмообразующего газа, прекурсор углерода и давление среды получены: графен, гидрированный графен, N-графен, графен с высоким содержанием атомов меди, окисленный графен. Графен, синтезированный при пиролизе пропан-бутановой смеси в плазме гелия при давлении 350 Торр, обладал наименьшими латеральными размерами: до 100 нм, что соответствовало требованиям к составу чернил в 2D печатных технологиях. На основе данных частиц были разработаны гибкие носимые биосенсоры для анализа пота, дыхания и мониторинга нервной системы. При введении в состав композита частиц нитрида бора, также синтезированного в плазменных условиях, получены мемристоры [1,2].

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ (грант №25-19-20035).

[1] Antonova I.V. *et al.* // Nanomaterials. 2020. V. 10. P. 2050.

[2] Shavelkina M.B. *et al.* // High Energy Chem. 2023. V. 57. P. S200.

**Каталитический пиролиз метана и вопросы повышения выхода
углеродных нановолокон**

А.Г. Баннов

*Новосибирский государственный технический университет,
просп. К. Маркса 20, Новосибирск, Россия
bannov_a@mail.ru*

DOI: 10.26902/Graphene-25-013

Переработка углеводородов ряда C_1 - C_4 с получением CO_x -нейтрального водорода представляет значительный интерес с фундаментальной и прикладной точек зрения. Большинство исследователей рассматривают каталитическое разложение метана как перспективный процесс получения водорода и углеродных наноматериалов.

Важным этапом в разработке подобных процессов для промышленности является оптимизация синтеза катализатора с целью получения наибольших выходов углеродных нановолокон (УНВ). В данной работе рассматриваются данные получения УНВ на Ni-содержащих катализаторах, полученных методом горения растворов (solution combustion synthesis, SCS).

Применение различных подходов, связанных с синтезом катализаторов, оптимизацией размеров частиц, может стать решением проблемы синтеза УНВ в укрупненных количествах. Было установлено, что применение Ni/ Al_2O_3 катализаторов позволяет достигать выходов УНВ на уровне 200 г/г_{кат} и выше только за счет использования определенного топлива для синтеза катализатора и его количества. Определено, что для некоторых видов топлива может быть получен катализатор, который способствует синтезу функционализированных УНВ, и позволяет в одну стадию проводить рост карбоксилированных, амидированных углеродных материалов.

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

Синтез малослойного графена в условиях самораспространяющегося высокотемпературного синтеза и спектр его применений.

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

Е.И. Калашникова¹, Овчинников Е.В.³, Посылкина О.И.⁴

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

²ФГБУ “НИИСК”, ул. Гапсальская 1, Санкт-Петербург, Россия

³ГРГУ им. Янки Купалы, ул. Элизы Ожешко 22, Гродно, Беларусь

⁴ФТИ НАН РБ, ул. Академика Купревича 10, Минск, Беларусь

alexey_informl@mail.ru

DOI: 10.26902/Graphene-25-014

Графеновые наноструктуры (ГНС) являются одним из самых перспективных классов материалов, которые за счет своих свойств имеют широкие перспективы применения в различных отраслях: от создания композиционных материалов до новых типов сорбентов. Однако, не смотря на весь потенциал ГНС, их применение на практике до сих пор не произошло по ряду причин. Во-первых, из-за несовершенства методик синтеза ГНС как по подходу “снизу-вверх”, так и по подходу “сверху-вниз” их себестоимость является слишком высокой, что делает их применение нерентабельным [1]. Во-вторых, конечная эффективность ГНС зависит от множества факторов: дисперсность, дефектность и т.д.

В нашей предыдущей работе [2] мы показали возможность синтеза малослойного графена (МГ, до 5 слоёв [3]) используя условия самораспространяющегося высокотемпературного синтеза (СВС) из таких прекурсоров как глюкоза, целлюлоза, лигнин и т.д. Данная методика позволяет получать большие объёмы материала (до 10 кг/мес. на уровне лабораторного производства) в виде порошка. Важной особенностью разработанного метода является возможность получения МГ без дефектов Стоуна — Уэйлса [4].

В докладе будут представлены результаты применения МГ за последние 3 года. Синтезированный МГ был успешно испытан при создании охлаждающих жидкостей на основе воды [5], материала для создания защитных покрытий [6], сорбента для очистки воды от промышленных красителей [7] и т.д. Также в докладе будут представлены результаты по испытанию МГ при создании композитов на основе эпоксидных смол, а также влияния МГ на почвенные микроорганизмы.

Работа выполнена при финансовой поддержке грантов БРФФИ № T23РНФМ и РНФ 24-49-10014.

[1] Gutiérrez-Cruz A., Ruiz-Hernández A.R., Vega-Clemente J.F., Luna-Gazcón D.G., Campos-Delgado J. // J. Mater. Sci. 2022. V. 57. № 31. P. 14543.

[2] Возняковский А.А., Возняковский А.П., Кидалов С.В., Осипов В.Ю. // ЖСХ. 2020. Т. 61. № 5. С. 869.

[3] ISO/TS 80004-13:2025. Nanotechnologies. Vocabulary. Part 13: Graphene and related two-dimensional materials.

[4] Voznyakovskii A.P., Neverovskaya A.Yu., Vozniakovskii A.A., Kidalov S.V. // Nanomaterials. 2022. V. 12. № 5. P. 883.

[5] Vozniakovskii A.A., Kalashnikova E.I., Kidalov S.V., Voznyakovskii A.P. // Carbon. 2025. V. 233. P. 119911.

[6] Возняковский А.А., Возняковский А.П., Титова С.И., Посылкина О.И., Кидалов С.В., Неверовская А.Ю., Овчинников Е.В. // ЖТФ. 2025. Т. 95. № 2. С. 304.

[7] Возняковский А.А., Богачева Е.А., Подложнюк Н.Д., Возняковский А.П., Кидалов С.В. // ЖТФ. 2025. Т. 95. № 2. С. 265.

Получение графеноподобного наноразмерного углерода детонационным разложением углеводородов

Д.К. Рыбин¹, А.А. Штерцер¹, В.Ю. Ульяницкий¹, И.С. Батраев¹, Д.В. Дудина^{1,2}

¹Институт гидродинамики им. М.А. Лаврентьева СО РАН,
просп. Акад. Лаврентьева 15, Новосибирск, Россия

²Институт химии твердого тела и механохимии СО РАН,
ул. Кутателадзе 18, Новосибирск, Россия

rybindenis1990@gmail.com

DOI: 10.26902/Graphene-25-015

Разработан метод получения наноразмерного детонационного углерода (НДУ) путем детонационного разложения ацетилена и других газообразных промышленных углеводородов на импульсном газо-детонационном аппарате, созданном на базе компьютеризированного комплекса детонационного напыления CCDS2000. НДУ образуется при детонации богатых ацетиленокислородных смесей $C_2H_2 + kO_2$ при $k < 1$ [1]. Исследования НДУ, получаемого в диапазоне k от 0,11 до 0,82 показали, что при $k < 0,6$ частицы углерода имеют округлую форму и размер в десятки нанометров, эти частицы полые и растут в диаметре с ростом k вплоть до 200 нм. При $k > 0,6$ частицы НДУ принимают форму чешуек (графеноподобный углерод) размером более 100 нм и толщиной порядка 10-20 нм (рис. 1) [1,2].

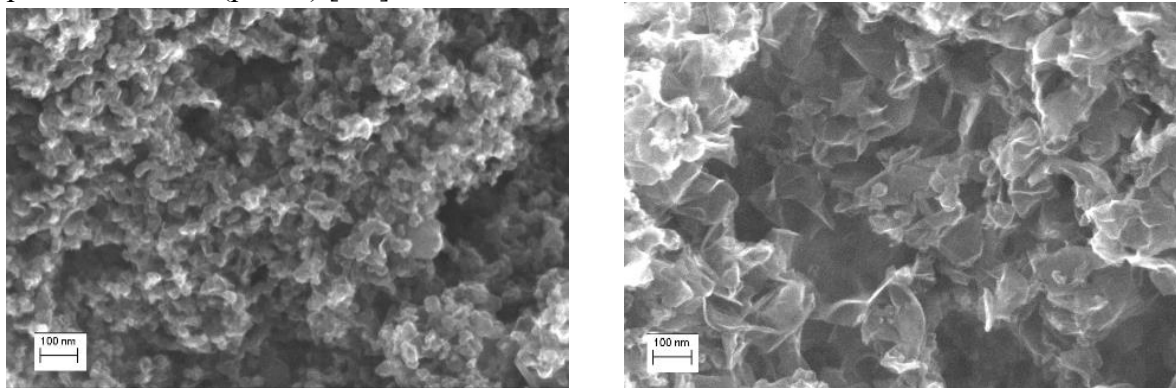


Рис. 1. Морфология частиц НДУ, полученного при $k = 0,25$ (слева) и $k = 0,67$ (справа).

Методом рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии выявлено присутствие адсорбированной воды, а также гидроксильных и карбонатных групп на поверхности частиц НДУ. При увеличении k от 0,11 до 0,68 удельная поверхность НДУ $S_{\text{вет}}$ уменьшается с 230 до 107 м²/г. Получение НДУ возможно не только детонационным разложением ацетилена [1,3], но и других промышленных углеводородов (этилен, пропилен, бутан) совместно с получением водорода [4].

Работа выполнена в рамках Гос. задания ИГиЛ СО РАН (рег. номер проекта АААА-А17-117021650056-0), при финансовой поддержке РФФ (грант № 21-19-00390) и фонда для молодых исследователей университета г. Тохоку (Tohoku University, Japan, grant No. 2018FS2).

- [1] Штерцер А.А., Ульяницкий В.Ю., Батраев И.С., Рыбин Д.К. // Письма в ЖТФ. 2018. Т. 44. № 9. С. 65.
- [2] Shtertser A.A. et al. // Diam. Relat. Mater. 2020. V. 101. P. 107553.
- [3] Shtertser A.A. et al. // Int. J. Hydrogen Energy. 2022. V. 47. P. 14039.
- [4] Shtertser A.A. et al. // Int. J. Hydrogen Energy. 2024. V. 55. P. 118.

Влияние режимов синтеза на электроёмкость лазерно-индуцированного графена

Р.Г. Зонов, К.Г. Михеев, Д.Л. Булатов, Т.Н. Могилева, А.В. Сюгаев, Г.М. Михеев

Удмуртский федеральный исследовательский центр,

ул. Т. Барамзиной 34, Ижевск, Россия

znv@udman.ru**DOI: 10.26902/Graphene-25-016**

Лазерно-индуцированным графеном (ЛИГ) называется углеродный материал, полученный лазерным пиролизом углеродосодержащего прекурсора. ЛИГ представляет собой губчатую высокопористую электропроводящую пленочную структуру, состоящую из нанокристаллитов графита с хаотично расположенными слоями графена. Типичный спектр комбинационного рассеяния света (КРС) ЛИГ приведен в ставке на Рис. 1, и он напоминает спектр КРС графена с дефектами.

В докладе представлены результаты исследований влияния мощности и скорости построчного сканирования пучка непрерывного углекислотного лазера по поверхности полиимидной пленки на формирование пленочной структуры ЛИГ и его электроёмкость [1]. При диаметре лазерного пучка около 120 мкм скорость сканирования варьировалась в диапазоне 10 – 400 мм/с. Измерения электроёмкости ЛИГ производились в одномольном водном растворе H_2SO_4 по двухэлектродной схеме. Установлено, что для каждой фиксированной скорости существует оптимальная мощность, при которой удельная электроёмкость принимает максимальное значение $C_{a,\text{max}}$. Найдено, что при скорости сканирования 10 мм/с $C_{a,\text{max}} = 74.5 \text{ мФ/см}^2$, что примерно в 27 раз больше $C_{a,\text{max}}$, полученной при скорости сканирования 400 мм/с (см. Рис. 1).

Показано, что причинами увеличения электроёмкости при уменьшении скорости сканирования лазерного пучка являются увеличение удельной поверхности ЛИГ, увеличение его плотности, а так же увеличение концентрации атомов азота в структуре синтезированного материала.

В докладе обсуждаются эти и другие свойства ЛИГ, сформированного на поверхности полиимидной пленки при различных режимах лазерного синтеза. Полученные результаты могут быть использованы для изготовления электродов микросуперконденсаторов, обладающих повышенной электрической ёмкостью.

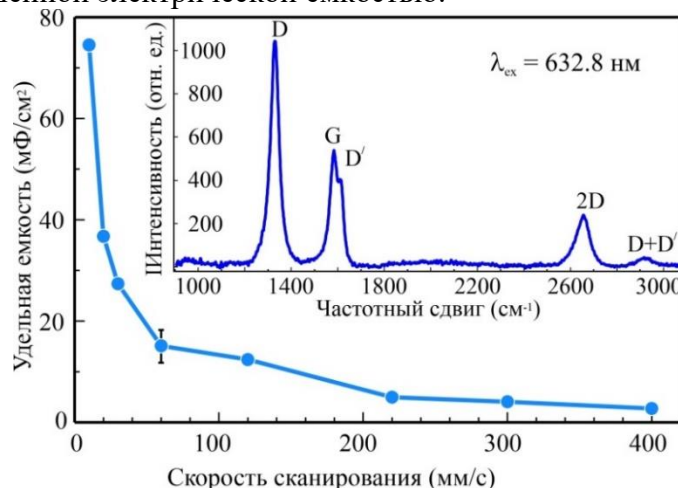


Рис. 1. Зависимость удельной ёмкости ЛИГ от скорости сканирования пучка лазера (вставка – типичный спектр комбинационного рассеяния света ЛИГ)

Исследования выполнены в рамках государственного задания Министерства науки и высшего образования РФ (тема № гос. регистрации 1022040600237-3-1.3.2).

[1] Zonov R.G. et al. // Diam. Relat. Mater. 2025. V. 157. P. 112529

Многоуровневая настройка тонких пленок однослойных углеродных нанотрубок для создания нового поколения перестраиваемых элементов для ИК и ТГц оптики

Н.И. Рагинов¹, А.В. Радивон², А.С. Езерский³, А.В. Черных³, А.В. Терентьев²,
К.В. Живетьев², И.И. Раков¹, Г.М. Катывба^{4,5}, И.В. Новиков¹, Е.Г. Циплакова³,
М.И. Пауков², В.В. Старченко², А.В. Арсенин², И.Е. Спектор⁴, С.А. Кузнецов⁶, К.И.
Зайцев⁴, Н.В. Петров³, М.Г. Бурданова^{2,4}, Б.П. Горшунов², В. Волков², А.Г. Насибулин¹,
Д.В. Красников¹

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

² Московский физико-технический институт, Институтский переулок 9 стр.3,
Долгопрудный, Россия

³ Университет ИТМО, ул. Саблинская 14, Санкт-Петербург, Россия

⁴ Институт общей физики им. А.М. Прохорова РАН, ул. Вавилова 38, Москва, Россия

⁵ Институт физики твёрдого тела РАН, ул. ак. Осипьяна 2, Черноголовка, Россия

⁶ Новосибирский государственный университет, ул. Пирогова 1, Новосибирск, Россия
d.krasnikov@skoltech.ru

DOI: 10.26902/Graphene-25-017

Уникальный набор механических, электрических и оптических свойств углеродных нанотрубок в течение нескольких десятилетий вдохновлял ученых и инженеров на создание новых материалов и устройств в различных областях жизнедеятельности: от медицины до авиации, от телекоммуникаций до строительных технологий. Несмотря на существенный прогресс в области функциональных материалов, обеспечивающий постепенное внедрение нанотрубок в такие изделия науки техники, как антистатические покрытия, литий-ионные аккумуляторы и полимерные композиты, развитие решений на основе углеродных нанотрубок в оптоэлектронике и биомедицине ограничено. Данная ситуация не в последнюю очередь связана с недостаточным контролем свойств нанотрубок. Важно отметить, что контроль необходим не только на рассматриваемом по умолчанию атомарном уровне (хиральность, дефектность, число стенок), но и на уровне морфологии, общей организации материала и т.д. Например, обычно рассматриваемые в качестве слабых ван-дер-Ваальсовы силы обеспечивают настолько сильное аксиальное взаимодействие нанотрубок, что их неразрушающее разделение становится практически невозможным.

В настоящем докладе представлен обзор недавних работ по тонкой настройке углеродных нанотрубок для создания элементной базы в ТГц и ИК диапазоне. Выделяя пять уровней [1] организации материала («атомарный/молекулярный» [2, 3], «супрамолекулярный» [4], «уровень морфологии» [5], «внутрипленочный» [6, 7], «межпленочный» [8]), мы трансформируем полифонию свойств углеродных нанотрубок для создания модуляторов, сенсоров и других ТГц устройств.

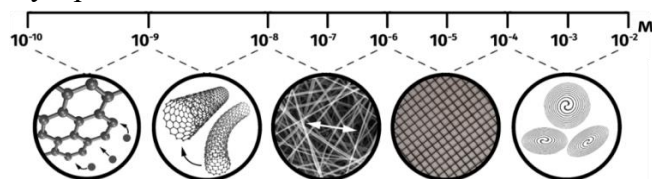


Рис. 1: схематичное представление концепции многоуровневой настройки ОУНТ.

[1] Novikov I.V. *et al.* // Adv. Mater. 2025. P. 241377.

[2] Burdanova M.G. *et al.* // Carbon. 2021. V. 173. P. 245.

[3] Kopylova D.S. *et al.* // Carbon. 2020. V. 167. P. 244.

[4] Novikov I.V. *et al.* // ACS Appl. Mater. Interfaces. 2022. V. 14. P. 18866.

[5] Paukov M.I. *et al.* // Ultrafast Sci. 2023. V. 3. P. 1.

[6] Katyba G.M. *et al.* // Optica. 2023. V. 10. P. 53.

[7] Novikov I.V. *et al.* // Chem. Eng. J. 2024. V. 485. P. 149733.

[8] Radivon A.V. *et al.* // Adv. Opt. Mater. 2024. V. 12. P. 2303282.

Амфотерная настройка сенсорных свойств одностенных углеродных нанотрубок с использованием органических допантов

В.И. Сысоев¹, Ю.В. Федосеева¹, Г.И. Семушкина¹, С.А. Лаврухина¹, Т.А. Герасева¹,
Л.Г. Булушева¹, А.В. Окотруб¹

¹*Институт неорганической химии им. А.В. Николаева СО РАН,
просп. Акад. Лаврентьева 3, Новосибирск, Россия.*

sysoev@niic.nsc.ru

DOI: 10.26902/Graphene-25-018

Экспресс-анализ качества воздуха является одной из ключевых технологий во многих сферах жизнедеятельности человека, что повышает спрос на разработку портативных газовых сенсоров. Особое внимание привлекают резистивные газовые сенсоры, которые отличаются низкой стоимостью и энергопотреблением, простотой регистрации сигнала, а также возможностью интеграции в электронные схемы. Одностенные углеродные нанотрубки (ОУНТ) демонстрируют высокую удельную площадь поверхности и проводимость, а также способность отдавать/принимать электроны, что делает их прекрасной платформой для создания эффективных чувствительных материалов для резистивных газовых сенсоров [1].

В настоящей работе, мы предлагаем методику создания гибридного материала на основе ОУНТ с органическими допантами для применения в чувствительных элементах газовых сенсоров. Осаждение органических допантов позволяет регулировать концентрацию, подвижность носителей зарядов в ОУНТ и не приводит к образованию дефектов и структурных деформаций. В качестве платформы использованы ОУНТ, состоящие из хорошо диспергированных пучков диаметром менее 30 нм, которые образуют сетку с низкой плотностью. В предыдущих работах нами показано, что такой сенсор обладает превосходными характеристиками для детектирования NO₂ при 150 °С [2,3]. Для нековалентной модификации ОУНТ использованы тетратиафульвален (ТТФ) в качестве донора электронов или тетратианохинодиметан (ТСНҚ) в качестве сильного акцептора электронов, которые приводят к n- или p-допированию ОУНТ [4]. Электронное состояние и взаимодействие компонентов гибридного материала изучено с помощью спектроскопии комбинационного рассеяния света и рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии. ТТФ/ОУНТ обладает улучшенными сенсорными свойствами по отношению к молекулам NO₂, показывая чувствительность 157%/ppm при 95 °С. Напротив, ТСНҚ/ОУНТ показывает низкую чувствительность к акцепторному газу, однако позволяет обнаруживать NH₃ с чувствительностью –4%/ppm при 90 °С. Квантово-химические расчеты показали, что результат достигается за счет донорно-акцепторных взаимодействий между органическими молекулами и ОУНТ, увеличивающих значения переноса заряда между ОУНТ и молекулами аналита. Данный подход рационального конструирования гибридного материала с тонкой настройкой уровня допирования углеродного материала позволяет регулировать чувствительность, увеличивать селективность или уменьшать интерференцию аналитов.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ (грант № 24-73-10039).

[1] Liu X. *et al.* // Appl. Phys. Lett. 2005. V. 86. P. 243501.

[2] Sysoev V.I. *et al.* // Carbon. 2025. V. 233. P. 119915.

[3] Sedelnikova O.V. *et al.* // Carbon. 2022. V. 186. P. 539.

[4] Rezapour M.R., Lee G., Kim K.S. // Carbon. 2019. V. 153. P. 525.

Оптимизация методики подготовки сеток и волокон из ОУНТ для использования в качестве активного материала электрохимических сенсоров

А.И. Вершинина, О.Р. Гордая, М.С. Рыбаков, М.В. Ломакин, Н.В. Иванова, Г.О. Еремеева
Кемеровский государственный университет, ул. Красная 6, Кемерово, Россия
annaver89@mail.ru

DOI: 10.26902/Graphene-25-019

На сегодняшний день однослойные углеродные нанотрубки (ОУНТ) пользуются спросом в качестве электродного материала для электрохимических сенсоров благодаря своим уникальным физическим, химическим и механическим свойствам

В данной работе представлена методика предварительной подготовки сеток и волокон ОУНТ для применения их в качестве электродного материала. Сетки ОУНТ получали аэрозольным CVD-методом синтеза с использованием этанола и ферроцена (200 ppm) в качестве прекурсоров [1]. В процессе синтеза ОУНТ протекают процессы, приводящие к образованию примесей (органические соединения, например, полиароматические углеводороды (ПАУ), каталитические частицы, аморфный углерод), которые могут значительно влиять на электропроводность нанотрубок. Наличие ПАУ было доказано нами путем качественного анализа пробы спиртового смыва на выходе из реактора методом высокоэффективной жидкостной хроматографии (ВЭЖХ). Высокая концентрация примесей может приводить к увеличению фоновых токов и появлению анодно-катодных пиков на вольтамперных кривых. В этой связи была предложена комбинированная методика очистки ОУНТ с помощью термического нагрева на воздухе при $T \sim 330^\circ\text{C}$ в сочетании с обработкой HCl и промыванием в неполярных и полярных растворителях с последующим формированием волокон «методом мокрого вытягивания» [2]. Исследования методом просвечивающей электронной микроскопии (ПЭМ) показали уменьшение доли каталитических частиц. Было также измерено электрическое поверхностное сопротивление (R_s) сеток ОУНТ четырехзондовым методом до и после обработки растворителями и показано уменьшение R_s в $\sim 1,9$ раз после обработки толуолом, а изопропанолом в $\sim 1,4$ раза. Сформированные волокна ОУНТ подвергали также «мягкому» окислению в 9% нитрующей смеси (HNO_3 и H_2SO_4 , 1:3 по объему) при 80°C в течение 30 минут, а также в 15% растворе H_2O_2 при 90°C в течение 15 минут.

Далее необходимо выполнить «активацию» электрода, для этого проводили измерения в открытой цепи, исследования методом электрохимической импедансной спектроскопии, хронопотенциометрии и циклирование потенциала. Все этапы выполнялись последовательно на потенциостате/гальваностате Parstat MC 2000 A в трехэлектродной ячейке с электродом сравнения Ag/AgCl (0,1 М KCl) в 0,1 М HCl. Измерения в открытой цепи показали, что потенциалы для волокон, обработанных нитрующей смесью, варьировались в диапазоне 440-470 мВ, а для обработанных в H_2O_2 380-420 мВ. Хронопотенциометрические измерения осуществлялись при токах 20 - 400 нА и времени 120 сек, и использовались как для активации волокна, так и для оценки его способности к поляризации. Установлено, что скорость поляризации 10 мВ/с является оптимальной и показывает возможность использования волоконного электрода в качестве сенсора. Циклирование осуществлялась с постепенным увеличением потенциального окна с 0,5 до 0,8 В и с 0 до 0,8 В при скорости 10 мВ/с по 20 циклов. После проведения указанных операций электрод может применяться в вольтамперометрическом анализе.

Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (проект № FZSR-2024-0005).

[1] Shandakov S.D. et al. // Carbon. 2018. V. 126. P. 522.

[2] Zhilyaeva M.A. et al. // Carbon. 2019. V. 150. P. 69-75.

Сорбционные свойства материалов на основе оксида графена

Ю.В. Иони¹, В.Р. Ибрагимова^{1,2}

¹*Институт общей и неорганической химии им. Н.С. Курнакова РАН,
Ленинский просп. 31, Москва, Россия*

²*МГУ им. М.В. Ломоносова, ул. Ленинские горы 1 стр. 73, Москва, Россия
acidladj@mail.ru*

DOI: 10.26902/Graphene-25-020

Оксид графена является ярким представителем 2D материалов графенового семейства. Он представляет собой монослой атомов углерода, находящихся в sp^2 и sp^3 -гибридизованном состоянии, покрытый большим количеством кислородсодержащих групп и дефектов. Оксид графена не имеет постоянного стехиометрического состава: его структура и свойства сильно зависят от способа получения [1]. Для его получения наиболее часто используется метод Хаммерса, при котором для окисления поверхности графита применяется большое количество концентрированной H_2SO_4 и $KMnO_4$ [2]. Сорбционные свойства полученных материалов на основе оксида графена сильно зависят от поверхностных функциональных групп и дефектов, поэтому подбор соответствующих условий синтеза (количество реагентов, природа исходного графита и др.) является важной задачей.

В данной работе был проведен синтез материалов на основе оксида графена из двух различных источников графита (искусственного и натурального) с различной степенью окисления. Также проводилась поверхностная модификация оксида графена путем обработки в газовом пламени. Все полученные образцы были охарактеризованы комплексом методов физико-химического анализа. Показано, что при использовании для окисления различного по природе происхождения графита по методу Хаммерса получается оксид графена с максимально схожими характеристиками. Различия в структуре и сорбционных свойствах были выявлены только для недоокисленных образцов оксида графена. Модификация путем сверхбыстрого пропускания порошка оксида графена через пропан-кислородное пламя приводит к поверхностному расширению слоев и частичному удалению некоторых функциональных групп оксида графена, однако в целом не изменяет его качественный и количественный состав.

Все полученные материалы на основе оксида графена использовались для модельной сорбции красителя метиленового голубого из водного раствора. Согласно полученным данным, полное удаление органического красителя для образцов переоxygenного и модифицированного оксида графена, происходит менее чем за 10 минут. Недоокисленный оксид графена, полученный из синтетического графита показал аналогичные сорбционные способности по отношению к выбранному красителю. При этом для образца недоокисленного оксида графена, полученного из природного графита, полное удаление метиленового голубого из водного раствора происходило в 2.5 раза медленнее. Таким образом, материалы на основе оксида графена с различным содержанием кислорода могут выступать как эффективные сорбенты для ряда катионных органических красителей, что в дальнейшем сможет найти применение для создания сорбентов для очистки сточных вод предприятий легкой промышленности.

Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ (грант № 22-19-00110-П).

[1] Ioni Y. *et al.* // Carbon Lett. 2024. V. 34. N. 4. P. 1219.

[2] Hummers W. S., Offeman R. E. // JAC Society. 1958. V. 80. P. 1339.

Влияние природы щелочного металла на активность углеродных нановолокон в каталитическом разложении муравьиной кислоты

В.В. Чесноков

*Институт катализа им. Г.К. Борескова СО РАН,
просп. Акад. Лаврентьева 5, Новосибирск, Россия**chesn@catalysis.ru***DOI: 10.26902/Graphene-25-021**

Интерес к водороду как высокоэффективному и экологически чистому источнику энергии обуславливает необходимость поиска удобных и безопасных способов его хранения и транспортировки. В последнее время привлекает широкое внимание использование муравьиной кислоты (МК) для хранения, транспортировки и получения водорода, в том числе для применения в топливных элементах. Низкая токсичность и воспламеняемость, высокое содержание водорода (53,4 г-Н₂/л или 4,4 мас. %) и ее жидкое состояние при нормальных условиях позволяют легко интегрировать МК в существующую инфраструктуру использования жидкого топлива.

МК может разлагаться по двум маршрутам с образованием Н₂ и СО₂ или Н₂О и СО. Поэтому катализатор должен обеспечивать одновременно высокую скорость реакции и селективность по водороду в широком диапазоне температур. В литературе описаны многочисленные исследования реакции газофазного разложения МК, большинство из них посвящено гетерогенным катализаторам на основе благородных металлов, таких как Pd, Pt, Au, Ru, Ag и их сплавов. Благородные металлы высокоактивны и избирательны к разложению муравьиной кислоты. Однако высокая стоимость и малая доступность этих катализаторов ограничивает их широкое применение. Поэтому проведены эксперименты по разложению муравьиной кислоты на углеродных нановолокнах, модифицированных щелочными металлами. Оказалось, что углеродные нановолокна способны вести разложение муравьиной кислоты преимущественно с образованием водорода и углекислого газа. Установлено, что каталитическая активность растет в последовательности: 4%LiOH/УНВ, 4%NaOH/УНВ, 4%KOH/УНВ, то есть, чем выше основность щелочного металла, тем выше активность катализатора. Следовательно, лимитирующей стадией реакции разложения муравьиной кислоты является взаимодействие муравьиной кислоты с щелочным металлом, стабилизированным на углеродной поверхности УНВ. Природа щелочного металла слабо влияет на селективность в реакции разложения муравьиной кислоты УНВ. С помощью рентгенофазового анализа и электронной микроскопии для катализаторов KOH/УНВ показано, что щелочная обработка приводит к модификации поверхности УНВ ионами калия, которые в виде функциональных групп (Me-O-C) равномерно распределены по углеродной поверхности, кроме того, при повышенном содержании нанесенного гидроксида калия присутствуют наночастицы гидрокарбоната калия.

Для сравнения проведено изучение каталитических свойств катализаторов 4%KOH/УНВ и 0,2%Pt/УНВ в разложении муравьиной кислоты. Активность катализатора 0,2%Pt/УНВ незначительно превышает активность 4%KOH/УНВ. Таким образом, вместо дорогостоящих и малодоступных платиновых катализаторов можно использовать углеродные нановолокна, модифицированные гидроксидом калия.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и Высшего образования Российской Федерации — проект № FWUR-2024-0036.

Лазерно-индуцированный перенос максенов на различные поверхности для функциональной электроники

А.А. Липовка¹, Р.Д. Родригес¹, Д. Коголев¹, Ж. Сонг², Р. Ванг², Е.С. Шеремет¹

¹Томский политехнический университет, просп. Ленина, 30, Томск, Россия

²Шанхайский институт керамики Китайской академии наук,

585 Heshuo Road, Шанхай, Китай

anya@tpu.ru

DOI: 10.26902/Graphene-25-022

Прогресс в синтезе и модификации двумерных (2D) материалов продолжает открывать новые возможности в области электроники, сенсоров и носимых устройств. Сейчас среди 2D материалов внимание привлекает не только графен. Например, перспективными являются открытые в 2011 году максены — карбиды и нитриды переходных металлов, обладающие высокой электрической проводимостью и гидрофильностью за счёт поверхностных функциональных групп (-ОН, -О-, -F). Эти свойства способствуют формированию дисперсий на их основе для осаждения токопроводящих плёнок на разные подложки. Однако низкая адгезия максенов к гидрофобным подложкам, таким как стекло и полимеры, существенно ограничивает их использование в функциональной электронике. Покрывания оказываются неоднородными, деградируют и отслаиваются. Также остаются нерешёнными вопросы долгосрочной стабильности максенов на подложках, особенно в условиях повышенной влажности и температуры.

В данной работе показано использование подхода лазерной обработки для формирования прочных и стабильных интерфейсов между максенами и жесткими (стекло) или гибкими (термопластичный полиуретан (TPU), полиэтилентерефталат (PET)) подложками. Подход лазерно-индуцированного переноса (Рис. 1) позволяет одновременно сохранить структуру максенов и повысить их адгезию к подложкам при лазерном спекании. Полученные интерфейсы демонстрируют стабильную электропроводность даже после воздействия высокой температуры и влажности. Кроме того, была показана работоспособность таких структур в составе электронагревателей, сенсоров изгиба и мемристоров. Полученные результаты открывают перспективы применения лазерной обработки как универсального подхода к интеграции максенов в долговечные электронные устройства.

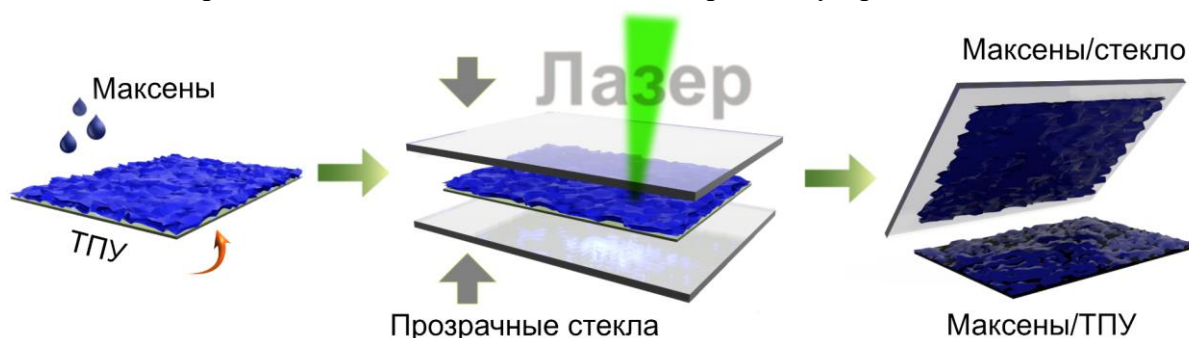


Рис. 1. Схема лазерно-индуцированного прямого и обратного (одновременно) переноса максенов на стекло и полимер.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ (грант № 23-42-00081. Российско-китайский грант, NSFC №62261136551).

**Функциональные монокристаллы алмаза:
рост, реальная структура, свойства и применение**

Ю.Н. Пальянов

*Институт геологии и минералогии им. В.С. СО РАН, просп. Акад. В.А. Коптюга 3,
Новосибирск, Россия
palyanov@igm.nsc.ru*

DOI: 10.26902/Graphene-25-023

Для решения различных задач в области наук о Земле, химии и физики высоких давлений, материаловедения и роста кристаллов высокобарических фаз в ИГМ СО РАН разработана оригинальная беспрессовая аппаратура «разрезная сфера» (БАРС). Научно-технический комплекс на базе аппаратов БАРС и совокупность разработанных методик позволяют проводить эксперименты в достаточно больших объемах при контролируемых Р-Т параметрах (3.8-7.8 ГПа, 800-2500°C) длительностью десятки и сотни часов.

Одной из актуальных задач является получение функциональных монокристаллов алмаза для широкого спектра высокотехнологических применений. Крупные высококачественные монокристаллы алмаза выращены в системах на основе Fe, Ni и Co. Экспериментально изучено влияние ростовых параметров на реальную структуру и свойства алмаза, что позволило определить оптимальные условия, исключая образование включений и минимизирующие внутренние напряжения, а также плотность линейных и планарных дефектов. Разработаны методы модифицирования реальной структуры и свойств алмаза за счет высокобарического отжига, радиационных воздействий и ионной имплантации.

В настоящее время для получения кристаллов с различными примесями и необычными свойствами идет активный поиск новых систем. Впервые синтезированы алмазы в расплавах германия, олова, сурьмы, меди и изучены их свойства. Алмаз рассматривается как один из перспективных материалов квантовой электроники. Для этого необходимо встроить в структуру алмаза такие примеси как Si, Ge, Sn, что успешно реализовано в системах на основе магния. Впервые синтезированы алмазы в расплавах редкоземельных металлов, которые позволяют более эффективно легировать кристаллы с образованием оптически-активных центров SiV, GeV и SnV. Поисковые исследования в системах с добавками примеси европия в различном зарядовом состоянии позволили синтезировать алмазы с новым дефектно-примесным центром 502 нм.

Результаты по росту функциональных монокристаллов алмаза доказали их реальную перспективность в различных областях науки и техники.

Алмазы, легированные примесями N, Si, Ge и Sn, представляют интерес для квантово-физических исследований и применений. Продемонстрирована перспективность GeV центров для использования в качестве ячеек квантовой памяти и температурных датчиков. Оптические элементы из выращенных алмазов успешно применяются при производстве ИК-Фурье спектрометров. Из крупных высококачественных алмазов, полученных в ИГМ СО РАН, серийно производятся алмазные скальпели для офтальмологии и нейрохирургии. Высокое совершенство реальной структуры выращенных монокристаллов обеспечивает перспективы их применения в качестве элементов рентгеновской оптики. Изготовлены алмазные окна для фронтендов СКИФа (Сибирского кольцевого источника фотонов). Полученные кристаллы используются для изготовления алмазных наковален, продемонстрирована перспективность монокристаллических матриц из выращенных кристаллов для создания алмаз/графитоподобных sp^2 - sp^3 гетероструктур с наноразмерными проводящими слоями внутри алмаза.

Исследование выполнено по государственному заданию ИГМ СО РАН № 122041400159-3 и за счет грантов Российского научного фонда № 14-27-00054, № 19-17-00075 и № 24-17-00032.

Механизмы роста алмазных плёнок: от зародышеобразования к контролируемому синтезу

П.Б. Сорокин

Национальный исследовательский технологический университет «МИСиС»,
Ленинский просп. 4 стр. 1, Москва, Россия

pbsorokin@misis.ru

DOI: 10.26902/Graphene-25-024

Современные исследования двумерных алмазных плёнок направлены на решение задач, связанных с зародышеобразованием и ростом sp^3 -гибридизированных структур. В докладе рассматривается взаимосвязь между термодинамикой фазовых переходов, кинетикой образования зародышей и экспериментальными подходами к синтезу, объединяющая теоретические прогнозы и практические результаты.

Ключевым аспектом является роль дефектов в графене как катализаторов межслоевого связывания. Дислокации и границы зёрен создают локальные зоны повышенной реакционной способности, снижая энергетический барьер для $sp^2 \rightarrow sp^3$ перехода. Химическая функционализация поверхности графена атомами водорода, фтора или кислородсодержащими группами играет критическую роль в стабилизации зародыша алмаза. Теоретические работы показывают, что насыщение связей подавляет графитизацию, а функциональные группы модулируют электронные и механические свойства плёнки.

Экспериментальные методы, такие как химическое осаждение под давлением, электронное и ионное облучение, демонстрируют прогресс в синтезе алмазных плёнок. Недавние работы подтверждают, что использование реакционных сред (например, воды) снижает критическое давление для фазового перехода, обеспечивая обратимое образование алмазоподобных структур. Однако контроль однородности и толщины плёнок остаётся сложной задачей, требующей оптимизации параметров роста. Анализ показывает, что рост алмазных доменов происходит через кооперативное взаимодействие функционализированных слоёв, где ключевую роль играет симметрия и адсорбционная активность подложки. Например, металлические подложки (Ni, Co) стабилизируют зародыши за счёт образования прочных межатомных связей [1].

Облучение бислоя графена на подложке лангасита через слой РММА также приводит к локальному фазовому переходу с образованием нанокластеров диамана. Спектроскопия комбинационного рассеяния света подтверждает увеличение доли sp^3 -углерода, а транспортные измерения выявляют рост сопротивления и появление нелинейных вольт-амперных характеристик (ВАХ), характерных для полупроводниковой фазы [2]. При этом воздействие достаточно сильного электрического поля приводит к нарушению sp^3 связей углерода, восстанавливая высокую проводимость биграфена [3]. С другой стороны, двумерные алмазные структуры могут образовываться в многослойном графене при облучении тяжёлыми ионами He^{26+} с энергиями 26–167 МэВ, что подтверждено методами ПЭМ и КР [4].

Таким образом, комбинация химической функционализации, управляемого облучения и выбора подложки открывает новые возможности для контролируемого синтеза двумерных алмазных плёнок с заданными свойствами. Полученные результаты имеют важное значение для создания новых углеродных материалов, имеющих широкое потенциальное применение.

Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ (грант № 25-79-20049).

- [1] Varlamova L.A., Erohin S.V., Sorokin P.B. // J. Phys. Chem. Lett. 2024. P. 11927.
- [2] Emelin E.V. et al. // Nanomaterials. 2022. V. 12. № 24. P. 4408.
- [3] Emelin E.V. et al. // Nanomaterials. 2023. V. 13. № 22. P. 2978.
- [4] Tomilin L.F. et al. // Carbon. 2024. V. 220. P. 118832.

**Моделирование проводящих свойств сильнолегированных алмаза и графена
методом стационарного гриновского оператора**

Н.И. Алексеев^{1,2}, И.В. Орешко^{1,2}, В.И. Зубков¹, Н.Н. Жогаль¹, А.В. Соломникова¹

¹СПбГЭТУ «ЛЭТИ» им. В.И. Ульянова (Ленина),

ул. профессора Попова 5, Санкт-Петербург, Россия

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

nialekseyev@yandex.ru

DOI: 10.26902/Graphene-25-025

Моделирование свойств сильнолегированного алмаза и, прежде всего, механизмов проводимости в нём (преимущественно, прыжковой проводимости) актуально при разработке приборов на основе алмаза, работающих в режиме прыжковой проводимости [1].

Известно, что задача прыжковой проводимости, эффективно реализующейся в сильнолегированном алмазе даже при комнатной температуре (RT), не слишком эффективно описывается традиционными моделями прыжковой проводимости типа моделей Абрамса и Эфроса-Шкловского. Уровень активации легирующей примеси очень мал даже при RT, и важное значение приобретает рассмотрение возбуждённых состояний акцепторной примеси (бора). В сильнолегированном алмазе эти состояния играют роль, близкую к роли компенсирующей примеси в узкозонных кремнии и германии при низкой температуре.

В докладе предлагается схема расчета зонной структуры примеси в регулярных сверхрешётках, сложность которых последовательно возрастает в направлении от линейной цепочки к графену, и затем алмазу, легированными замещающей примесью с различной концентрацией и различных вариантах сверхрешётки.

Ценность графена как модельного объекта, более простого по сравнению с алмазом, состоит в выявлении особенностей задачи, связанной с наличием вложенных подрешёток в исходном нелегированном материале.

Акцент делается, далее, на трансформацию характерных ширин и положений зон, формируемых основным и возбуждёнными уровнями примеси; положение этих уровней в условиях бесконечно разбавленной примеси считается известным.

Даже без усреднения задачи по уровням возбуждения близкорасположенных примесных атомов и деталям их взаиморасположения расчёт позволяет соотнести характерные области поведения проводимости на плоскости (концентрация примеси – температура) с экспериментальными тенденциями.

В частности, существование изломов на кривых зависимостей проводимости от температуры, относящихся к достаточно высокому уровню легирования, отвечает наложению уровня Ферми на границы зон возбуждённых состояний примеси. Положение изломов близко к экспериментальным.

Исследование проводилось в рамках проекта № FSEE-2024-0005 (государственное задание Министерства науки и высшего образования Российской Федерации № 075-00003-24-00).

[1] Oyama K. *et al.* //Appl. Phys. Lett. 2009. V. 94. N. 15. P. 152109.

**Влияние характеристик МУНТ на электрофизические свойства
композитов на основе полиамида**

А.В. Заворин, С.И. Мосеенков, В.Л. Кузнецов
*Институт катализа им. Г.К. Борескова СО РАН,
просп. Акад. Лаврентьева 5, Новосибирск, Россия*
zavorin@catalysis.ru

DOI: 10.26902/Graphene-25-026

Многостенные углеродные нанотрубки (МУНТ) обладают уникальными физико-химическими свойствами, что позволяет использовать их в композиционных и функциональных материалах для различных областей жизнедеятельности человека от применения в качестве армирующего компонента до применения в электрохимических приложениях. Одним из важных свойств углеродных нанотрубок является наличие электропроводности, что позволяет использовать их в качестве токопроводящей добавки при создании токопроводящих материалов (например, для снятия статического заряда). Электропроводность таких материалов, как правило, определяется характером распределения углеродных нанотрубок в полимерной матрице и количеством контактов между индивидуальными МУНТ.

Основными характеристиками МУНТ, которые определяют величину порога их перколяции в композите, являются внешний диаметр и аспектное отношение. Как правило, длинных и тонких нанотрубок требуется значительно меньше для формирования проводящей структуры в композите. Примером этого могут являться одностенные нанотрубки OCSiAl, для которых величина порога перколяции составляла 0.05 – 0.5 в зависимости от композита и способа его получения. Еще одной важной характеристикой, определяющей величину порога перколяции, которую, как правило, не принимают во внимание, является морфология первичных агломератов нанотрубок. Здесь можно выделить несколько основных типов: вертикально ориентированные упорядоченные массивы, образцы МУНТ, полученные на подвижном носителе (волокне), разделенные друг от друга протяженные тяжи МУНТ, перепутанные тяжи МУНТ и клубки нанотрубок. Каждый из этих типов МУНТ требует различных энергозатрат на распределение нанотрубок в матрице композита, что является причиной уменьшения аспектного отношения нанотрубок. При этом более упорядоченные МУНТ (массивы и т.п.) способны распределяться в матрице композита при меньшем воздействии, чем тяжи и клубки нанотрубок, что способствует сохранению аспектного отношения нанотрубок и снижению их порога перколяции. Таким образом, определение влияния морфологии МУНТ является важным для оптимизации получения композитов на их основе.

В данной работе проведено комплексное исследование влияния морфологии МУНТ на электрофизические свойства получаемых композитов. Структура исходных МУНТ охарактеризована методами ПЭМ, РЭМ, РФА, БЭТ. Проведено исследование структуры композитов методами оптической микроскопии и РЭМ, определены концентрационные зависимости проводимости и величина порога перколяции композитов, получаемых путем механического смешения в расплаве матрицы полиамида и МУНТ с различной морфологией.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования РФ в рамках государственного задания Института катализа СО РАН (проект FWUR-2024-0034).

Полимерные электропроводящие композиты – влияние морфологии на функциональные свойства

В.А. Кузнецов^{1,2}

¹*Институт неорганической химии им. А.В. Николаева СО РАН,
просп. Акад. Лаврентьева 3, Новосибирск, Россия*

²*Новосибирский государственный технический университет,
просп. К. Маркса 20, Новосибирск, Россия
vitalii.a.kuznetsov@gmail.com*

DOI: 10.26902/Graphene-25-027

Полимерные электропроводящие композиционные материалы на основе диэлектрических полимерных матриц с электропроводящими нанонаполнителями представляют интерес с точки зрения создания новых функциональных электропроводящих элементов для электроники, в том числе тензорезистивных и газосенсорных. При этом морфология композитов, то есть взаимное расположение наночастиц наполнителя друг относительно друга и относительно полимерной матрицы, определяет набор прикладных и фундаментальных характеристик композитов. В рамках представляемой работы исследованы электронные транспортные, термоэлектрические и тензорезистивные свойства полимерных композитов различной морфологии с равномерно распределенными частицами электропроводящей фазы. Различную морфологию композитов удалось получить благодаря использованию различных по морфологии наполнителей (одностенные и многостенные углеродные нанотрубки, наночастицы графита) и различных полимерных матриц (полибензимидазол, ароматический полиамид, хитозан), обеспечивающих разное взаимодействие макромолекул полимера с частицами электропроводящей фазы. Комплекс экспериментальных данных по исследованию электронных транспортных, термоэлектрических и тензорезистивных свойств в совокупности с данными, полученными с помощью электронной микроскопии и спектроскопических методов, позволил установить морфологию композитов, что в дальнейшем найдет применение при создании композиционных материалов заданной морфологии с предсказуемыми функциональными характеристиками.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 24-79-10223, <https://rscf.ru/project/24-79-10223/>.

**Квазикристаллы из слоев 2D гексагональных атомных решеток:
структуры, свойства, приложения**

Л.А. Чернозатонский

*Институт биохимической физики им. Н.М. Эмануэля РАН, ул. Косыгина 4,
Москва, Россия**chernol-43@mail.ru***DOI: 10.26902/Graphene-25-028**

Необычные физические свойства 2D бислоев из молекулярно связанных атомных гексагональных скрученных решеток, определили новое направление, названное твистроникой [1]. В последнее время эксперименты с бислоями с различными по атомному составу несоразмерными решетками с поворотами на 30° [2] привели к широкому кругу исследований таких квазикристаллов (QC). Потенциал несоразмерных решеток, изменяющий зонную структуру бислоя, приводит к особым электронным, оптическим, тепловым и механическим свойствам.

В докладе рассматриваются: бислойные и трехслойные графеновые квазикристаллы (2GQC и 3GQC), история предсказаний и первых наблюдений таких мозаичных структур; появление набора плоских зон в электронных спектрах 2GQC и 3GQC, связанные с ним сверхпроводимость, оптика и экситонная физика, топологические аномалии в QC конечных размеров; современное состояние исследований квазикристаллов из биатомных решеток (h-BN и TMD, в частности – их особенностей полярной структуры [3]); муаровые периодические и квази- структуры в трехслойке GQC/hBN [4].

Рассмотрены модели плиточных мозаик 3QC объектов из разнесенных слоев [5]: учет их трехмерности выявляет для 3QC "цветную" симметрию – для 3QC одноатомных (C, Si, Ge и др.) решеток - 6-порядка – Рис.1а, а не симметрию 18-го порядка в обычно используемой модели неразделенных решеток. Для 3QC из двухатомных (BN, MoS₂ и др.) решеток цветная мозаика имеет симметрию 3-порядка. По симметрии «цветной» 3QC мозаики должны определяться 3QC свойства, связанные с их цветной вращательной симметрией (например, нелинейные оптические и оптоэлектронные эффекты в поляризованном свете).

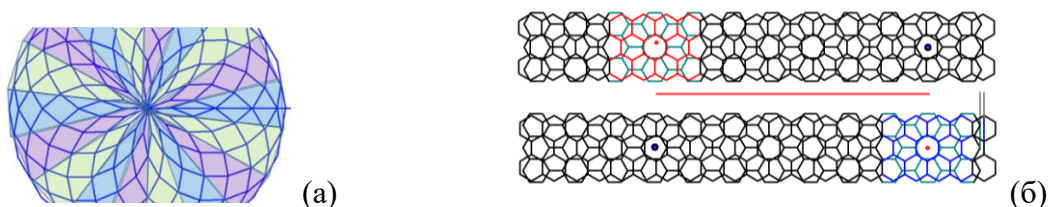


Рис. 1.

Исследован эффект «гигантского» ~ 10 нм сдвига центра 2QC и 3QC мозаик при малом ~ 0.1 нм сдвиге слоя в узле схода плиток первоначальной структуры (Рис. 1б), приведены примеры применения QC как элемента электронных устройств на основе контролируемого переключения центров квантовых QC точек в области пересечения графеновых нанолент и связанного с ним изменения электронного спектра [6].

Таким образом многослойные квазикристаллы открывают новое ответвление твистроники.

- [1] Carr S. *et al.* // Phys. Rev. B. 2017. V. 95. P. 075420.
- [2] Ahn S. *et al.* // Science. 2018. V. 361. P. 782.
- [3] Tsang C.S. *et al.* // Science. 2024. V. 386. P. 198.
- [4] Lai X. *et al.* // Nat. Mater. 2025. <https://doi.org/10.1038/s41563-025-02222-w>.
- [5] Чернозатонский Л.А. // Письма в ЖЭТФ. 2025. Т. 121. № 8. С. 662.
- [6] Chernozatonskii L.A., Danilin V.A., Demin V.A. // 2025. (in preparation).

Нарушение топологической защиты в краевых состояниях 2D топологического изолятора

И.В. Крайнов¹, Р.А. Ниязов^{1,2}, Д.Н. Аристов^{1,2}, В. Ю. Качоровский¹

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

²НИЦ “Курчатовский Институт” - ПИЯФ, Гатчина, ул. Орлова роца 1, Россия

kachor.valentin@gmail.com

DOI: 10.26902/Graphene-25-029

На краю 2D топологического изолятора (ТИ) существуют 1D геликоидальные состояния (ГС), причём электроны в ГС, имеющие противоположные импульсы, имеют также противоположные спины. В теории эти состояния защищены топологически, что предотвращает рассеяние на немагнитном беспорядке. Однако эксперименты показывают сильное рассеяние в образцах длиной более 3 мкм, слабо зависящее от температуры, T [1]. Мы предлагаем механизм рассеяния назад, связанный с заряженными островками рядом с краем, которые захватывают электроны через туннельную связь с ГС [2]. Ключевое отличие от предыдущих работ, изучающих рассеяние назад за счет наличия островков (см., например, [3]) – отсутствие неупругих процессов в островке, что делает темп рассеяния назад почти независимым от T . В модельной задаче об островке в виде отверстия в 2D ТИ (см. Рис. 1 (а)) в отсутствие взаимодействия вклады от траекторий электронов по (R) и против (L) часовой стрелки сокращают друг друга, так что амплитуда рассеяния назад равна нулю. При наличии взаимодействия флуктуирующий циркулярный ток в кольце, $J = g(N_R - N_L)$ (здесь $N_{R,L}$ – число правых (левых) электронов в ГС, g – сила взаимодействия) приводит к различию фаз R- и L-электронов при обходе островка. Это вызывает конечное рассеяние, пропорциональное $\langle (\sin J)^2 \rangle$, которое практически не зависит от T , но слабо зависит от магнитного потока, ϕ , через островок (см. Рис.1 (b)).

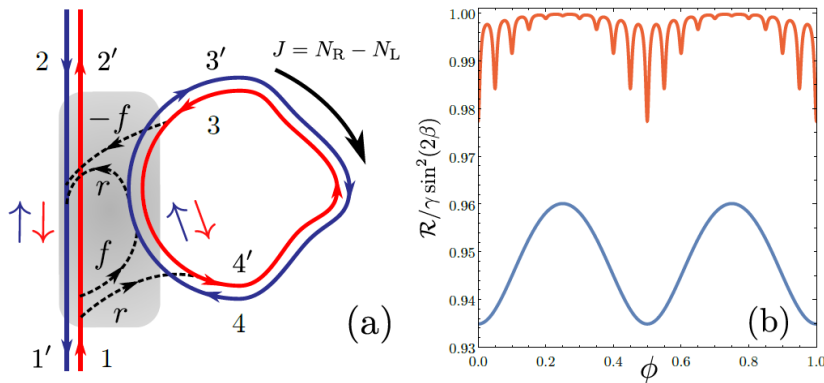


Рис.1: (а) Островок вблизи края 2D ТИ; (б) Зависимость рассеяния назад от ϕ при разной силе туннелирования в островок.

Результат обобщён для реальной модели диффузионного островка с множеством случайных траекторий. Показано, что классический (диффузон) и квантовый интерференционный (куперон) вклады сокращают друг друга при $g = 0$, но приводят к увеличению вероятности рассеяния назад при $g \neq 0$, пропорциональной $\ln(\tau\phi/\tau)$, где $\tau\phi$ – время сбоя фазы, а τ – время упругого рассеяния. Поэтому зависимость от T логарифмически медленная, что согласуется с экспериментом. Интересно, что длина локализации в ГС, возникающая при взаимодействии с большим числом островков, уменьшается по мере увеличения темпа сбоя фазы, в контрасте с обычными системами, где сбой фазы подавляет локализацию.

Работа выполнена при поддержке РФФИ 25-12-00212.

[1] Olshanetsky E., Kvon Z., Gusev G., Mikhailov N. // Physica E. 2023. V. 147. P. 115605.

[2] Krainov I., Niyazov R., Aristov D., Kachorovskii V. // arXiv:2410.04610 (2024).

[3] Väyrynen J., Goldstein M., Glazman L. // Phys. Rev. Lett. V. 110. P. 216402.

Динамика изгибных фононов в графене и других двумерных гибких материалахА.Д. Коковин^{1,2}, В.Ю. Качоровский³, И.С. Бурмистров¹¹ИТФ им. Л.Д. Ландау РАН, просп. Акад. Семенова 1а, Черноголовка, Россия²Московский физико-технический институт, Институтский переулок 9 стр.3,
Долгопрудный, Россия³ФТИ им. А.Ф. Иоффе РАН, ул. Политехническая 26, Санкт-Петербург, Россия
burmi@itp.ac.ru**DOI: 10.26902/Graphene-25-030**

Как известно [1], специфика статических изгибных деформаций в гибких двумерных кристаллических материалах связана с тем, что из-за взаимодействия фононов изгибная жесткость, κ , начинает зависеть от волнового вектора, q , или характерного размера, L : $\kappa \sim q^{-\eta}$ или $\kappa \sim L^{\eta}$. Значение критического индекса η известно только численно, $\eta=0.795$. В тоже время, как взаимодействие фононов влияет на динамику двумерных мембран оставалось не изученным. В случае свободно подвешенных кристаллических мембран недавно было теоретически предсказано [2], что в пределе малых волновых векторов мнимая часть спектра изгибных фононов оказывается порядка его действительной части.

Наличие затухания изгибных фононов порядка действительной части их частоты находится в противоречии с экспериментами по высокой добротности (вплоть до 1000 при низких температурах) наномеханических резонаторов на основе графена. В нашей работе [3] предложено объяснение такой высокой добротности, связанное с наличием в наномеханических графеновых мембранных резонаторах конечного натяжения σ . Конечное натяжение σ делает спектр изгибных фононов акустическим ($\omega \sim q$) на совсем малых волновых векторах, в то же время, почти не оказывая влияния на взаимодействие фононов и, как следствие, на затухание изгибных фононов. Аккуратное вычисление затухания изгибных фононов в области малых волновых векторов при наличии натяжения приводит к зависимости добротности от размера мембраны, температуры и натяжения: $Q \sim (1/L)^2 (Y/\sigma)^{1+a} (T/\kappa)^a$, где $a=\eta/(2-\eta)$, $l=(\kappa/Y)^{1/2}$, где Y - модуль Юнга двумерного кристалла. Температурная зависимость полученного Q находится в качественном согласии с экспериментальными данными. Этот результат объясняет природу загадочной высокой добротности колебаний мембран при наличии конечного натяжения.

[1] Nelson D., Piran T., Weinberg S. Statistical Mechanics of Membranes and Surfaces // World Scientific (2004).

[2] Kokovin A.D., Kachorovskii V.Yu., Burmistrov I.S. // Phys. Rev. Lett. 2024. V. 113. P. 136203.

[3] Kokovin A.D., Burmistrov I. S. // Phys. Rev. B 2024. V. 110. P. 125432.

Ячеистые углеродные структуры как основа для новых материалов: молекулярная динамика

Ю.А. Баимова, Е.А. Рожнова

¹Институт проблем сверхпластичности металлов РАН, ул. Халтурина 39, Уфа, Россия

²Уфимский университет науки и технологий, ул. Заки Валиди 32, Уфа, Россия

julia.a.baimova@gmail.com

DOI: 10.26902/Graphene-25-031

Исследование трехмерных (3D) пористых углеродных наноструктур является одной из актуальных проблем в различных промышленных приложениях. Такие структуры, как аэрогели и смятый графен, легкие, имеющие большую площадь свободной поверхности, обладают высокой пористостью и высокой прочностью. Графеновые аэрогели или сотовые структуры — новый многообещающий класс материалов, свойства которых можно регулировать путем изменения их морфологии. Аэрогели представляют собой высокопористые твердые пены, имеющие взаимосвязанную сеть тонких, но прочных графеновых стенок.

Механические свойства графеновых аэрогелей имеют большое значение для электроники, наномеханических устройств, создания новых композитов. Данные аэрогели демонстрируют высокую прочность [1-3]. Некоторыми недостатками графенового аэрогеля являются объемная усадка и деформация пористых каркасов, которые влияют на механические свойства. При этом такие структуры сверхупругие и хорошо сжимаемые.

В настоящей работе методом молекулярно-динамического моделирования исследованы механические свойства трех различных морфологий графенового аэрогеля при растяжении. Изучена и проанализирована прочность при растяжении вдоль различных направлений решетки. Изучено влияние температуры на деформационное поведение. В процессе деформации при 300 К напряжение не меняется до деформации 0.25, что объясняется простым изменением формы сотовых ячеек. Деформация вызывает легкое изгибание структуры, за которым следует серия коллапсов ячеек, и структура становится плоской. Стенки сотовых ячеек практически не напряжены.

Показано, что структурные изменения существенно зависят от морфологии структуры, типа и направления нагружения. На первой стадии деформации не наблюдается увеличения напряжений за счет структурной трансформации. Далее происходит концентрация напряжений на стыках сотовой конструкции и по стенкам. Полученные результаты способствуют пониманию механизмов микроскопической деформации графеновых аэрогелей и их конструкции для различных применений.

[1] Guo F. *et al.* // Nat.Comm. 2018. V.9. P. 881.

[2] Wang H., Cao Q., Peng Q., Liu S. // Nanomaterials. 2019. V. 9. P. 109.

[3] Baimova J.A., Shcherbinin S.A. // Materials. 2023. V. 16. P. 7388.

Тонкая структура и оптические свойства интерфейсных экситонов на латеральных гетеропереходах

М.В. Дурнев, Д.С. Смирнов

ФТИ им. А.Ф. Иоффе, ул. Политехническая 26, Санкт-Петербург, Россия
durnev@mail.ioffe.ru

DOI: 10.26902/Graphene-25-032

Гетероструктуры на основе атомарно тонких слоёв дихалькогенидов переходных металлов (ДПМ) являются предметом активных научных исследований в последние десять лет [1]. Основное внимание уделяется вертикальным (ван-дер-ваальсовым) гетероструктурам, которые состоят из нескольких наложенных друг на друга монослоёв различных материалов. Помимо вертикальных стэков различных ДПМ, сравнительно недавно были синтезированы так называемые латеральные гетероструктуры, в том числе с атомарно резкими интерфейсами [2, 3]. В этих структурах монослои различных ДПМ «сшиваются» в плоскости, образуя одномерные гетеропереходы (Рис. 1).

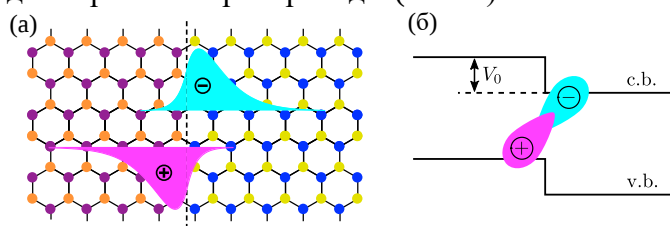


Рис. 1. (а) Схематическое изображение интерфейсного экситона, локализованного на латеральном гетеропереходе. Кружками разных цветов изображены атомы металлов и халькогенов, различные по разные стороны от гетероперехода. (б) Разрыв зон второго рода на латеральном гетеропереходе.

Так же как и в вертикальных гетероструктурах, электрон и дырка на латеральном гетеропереходе пространственно разделены благодаря разрыву зон второго рода и могут образовывать не прямые интерфейсные экситоны [4, 5]. Тонкая структура спектра и оптические свойства интерфейсных экситонов в значительной степени определяются микроскопическим строением гетероинтерфейса. В частности, интерфейс типа «armchair», изображённый на рис. 1, приводит к смешиванию электронных состояний в долинах К и К', расположенных в противоположных вершинах зоны Бриллюэна. В работе развита микроскопическая теория такого смешивания и рассмотрены физические эффекты, индуцированные смешиванием долин [6]. В частности, показано, что долинное смешивание приводит к новому эффекту – зеемановскому расщеплению электронных и экситонных состояний магнитным полем, лежащим в плоскости слоя. Независимо от кристаллографической ориентации низкая симметрия латерального гетероинтерфейса приводит к линейной поляризации фотолюминесценции интерфейсных экситонов. В работе показано, что линейная поляризация возникает за счёт поляризационной чувствительности матричных элементов оптических переходов, связанной с тригональным искажением энергетического спектра электронов и дырок. Степень линейной поляризации экситонов рассчитана для произвольной ориентации гетероинтерфейса, а также в присутствии внешних электрического и магнитного полей.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант № 22-12-00211-П).

- [1] Novoselov K.S. *et al.* // Science. 2016. V. 353. P. aac9439.
- [2] Huang C. *et al.* // Nat. Mater. 2014. V. 13. P. 1096.
- [3] Sahoo P.K. *et al.* // Nature. 2018. V. 553. P. 63.
- [4] Lau K.W. *et al.* // Phys. Rev. B. 2018. V. 98. P. 115427.
- [5] Rosati R. *et al.* // Nat. Commun. 2023. V. 14. P. 2438.
- [6] Durnev M.V., Smirnov D.S. // Phys. Rev. B. 2025. V. 111. P. 205403.

Как избежать наиболее частых ошибок в характеристике оксида графена

А.М. Димиев

*Казанский (Приволжский) федеральный университет,
Химический институт им. А.М. Бутлерова, ул. Кремлевская 29/1, Казань, Россия
amdimev@kpfu.ru*

DOI: 10.26902/Graphene-25-033

Интерес научного сообщества к оксиду графена (ОГ) за два последних десятилетия привел к значительному прогрессу как в практическом использовании, так и в понимании свойств этого материала. В работы с ОГ вовлечено широкое сообщество исследователей, включая специалистов в области химии, физики, и материаловедения. Широкий интерес к материалу, несомненно, является одной из сильных сторон этой области исследований. Однако, одновременно это приводит к многочисленным ошибкам в интерпретации экспериментальных данных, связанным с непониманием особенностей данного материала, особенно среди исследователей, начинающих работу с ОГ. Особенно сильно данная проблема проявляется при использовании некоторых наиболее распространенных методов характеристики ОГ, таких как ИК спектроскопия, Рамановская спектроскопия и рентген-фотоэлектронная спектроскопия.

К сожалению, некоторые явно ошибочные способы обработки и анализа данных, полученных этими методами, получили широкое распространение в современной литературе. Часто ошибки в интерпретации экспериментальных данных полностью сводят на нет основные выводы исследований, сделанные на основе этих данных. Более того, отдельные ошибки в интерпретации экспериментальных данных создали в современной литературе «параллельную реальность» якобы «проверенных» подходов и данных. Особенно это касается Рамановской и ИК спектроскопии. О масштабе проблемы говорит тот факт, что в сегодняшней литературе публикации с неверной интерпретацией превышают число правильных работ от экспертов в области ОГ. Во многих случаях экспериментальные данные, представленные в разных работах, трудно сравнивать из-за отсутствия стандартизированных способов интерпретации. Целью данного доклада является обзор наиболее частых ошибок в характеристике ОГ и практические рекомендации о том, как избежать этих ошибок. Доклад основан на многолетнем опыте докладчика в области ОГ, а также опыте ряда других признанных экспертов в данной области знаний. Особый акцент сделан на таких методах как ИК спектроскопия, Рамановская спектроскопия и РФЭС.

Влияние плазменной обработки на электрохимическую активность углеродных наностенок

С.А. Евлашин¹, Д.А. Чернодубов², О.Н. Дубинин¹, Ф.С. Федоров¹, Н.Д. Орехов³,
А.М. Мумляков⁴, З.И. Попов⁵

¹Сколтех, Большой бульвар 30 стр. 1, Москва, Россия

²НИЦ «Курчатовский институт», пл. Академика Курчатова 1, Москва, Россия

³МФТИ, Институтский переулок 9, Долгопрудный, Россия

⁴ИНМЭ РАН, Ленинский просп. 32А, Москва, Россия

⁵ИБХФ РАН, Косыгина 4, Москва, Россия

s.evlashin@skoltech.ru

DOI: 10.26902/Graphene-25-034

Углеродные наноматериалы привлекают большой интерес в области электрохимии за счёт большой удельной поверхности и возможности их функционализации. Для функционализации могут использоваться как различные оксиды металлов, благородные металлы, так и гетероатомы, которые встраиваются в структуру углеродных материалов и существенно изменяют их характеристики.

В данной работе в качестве материала для исследования электрохимических характеристик были выбраны углеродные наностенки, которые были получены с использованием плазмохимического синтеза в разряде постоянного тока и в ёмкостно-связанной плазме. Углеродные наностенки представляют собой вертикально ориентированные графеновые слои и обладают большой удельной поверхностью, что делает их перспективным материалом для реализации электрохимических источников тока. Использование двух разных разрядов позволяло получать углеродные наностенки разного структурного совершенства, которое оказывало разное влияние на протекающие электрохимические реакции. Для изменения активности материалов была применена дополнительная плазменная обработка в тлеющем разряде постоянного тока, а также обработка в индуктивно связанной плазме. Проведённая обработка позволила установить влияние разных типов гетероатомов на протекающие реакции восстановления кислорода, реакции разложения воды, а также на формирование удельной ёмкости.

При изучении влияния обработки на получаемые значения удельной ёмкости была проведена оценка вклада двойнослойной и псевдоёмкости. Для оценки вклада разных типов ёмкости были использованы две разные модели, которые показали хорошую корреляцию. Помимо этого, полученные экспериментальные результаты были объяснены с использованием расчётов молекулярной динамики и теории функционала электронной плотности. Результаты работы были опубликованы в работах [1-4].

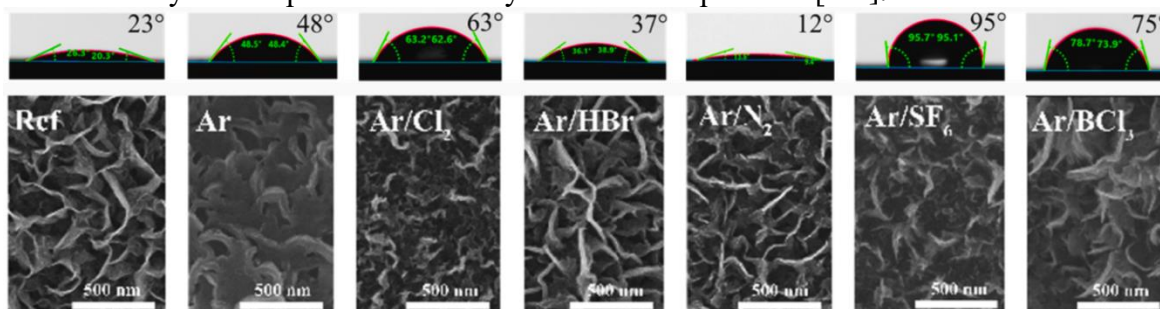


Рисунок 1 – Фотографии структур и углы смачивания после обработки в разных условиях. Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ (грант № 22-73-10198 <https://rscf.ru/project/22-73-10198/>).

- [1] Bondareva J.V. *et al.* // *Electrochim. Acta*. 2025. V. 513. P. 145522.
- [2] Evlashin S.A. *et al.* // *J. Electroanal. Chem.* 2024. V. 956. P. 118091.
- [3] Evlashin S.A. *et al.* // *J. Phys. Chem. Lett.* 2020. V. 11. № 12. P. 4859.
- [4] Bondareva J.V. *et al.* // *Sci. Rep.* 2025.

Модифицирование углеродного носителя нитридом углерода для улучшения каталитических свойств Pd/C катализаторов получения водорода из муравьиной кислоты

Д.А. Булушев¹, Ф.С. Голубь¹, С.В. Трубина², Е.Ю. Герасимов¹

¹Институт катализа им. Г.К. Борескова СО РАН,
просп. Акад. Лаврентьева 5, Новосибирск, Россия

²Институт неорганической химии им. А.В. Николаева СО РАН,
просп. Акад. Лаврентьева 3, Новосибирск, Россия

dmitri.bulushev@catalysis.ru

DOI: 10.26902/Graphene-25-035

2D материалы (g-C₃N₄, графен, MoS₂, ковалентные триазиновые каркасы, и др.), а также композиты с этими материалами широко используются в качестве носителей для катализаторов различных реакций. В данной работе рассмотрена роль модифицирования поверхности углеродного материала Сибунит нитридом углерода для Pd катализаторов получения водорода из муравьиной кислоты.

Нитрид углерода наносили на Сибунит пиролизом меламин на воздухе при 673 и 823 К. В качестве прекурсора Pd использовали ацетилацетонат палладия. Перед измерением каталитической активности и физико-химическими исследованиями полученные материалы обрабатывали в восстановительной среде смесью муравьиной кислоты в аргоне в течение 30 мин при 573 К.

Показано, что оптимальным соотношением меламин к Сибуниту является 1:2. В этом случае катализатор проявлял максимальную каталитическую активность высокую стабильность и очень высокую селективность (> 99%). Каталитическая активность была в 5 раз выше, чем для катализатора Pd/C без нитрида углерода, содержащего наночастицы со средним размером 2.3 нм. На поверхности модифицированного катализатора образовывались, как атомарные формы Pd, так и наночастицы со средним размером 1.6 нм. При более высоких соотношениях меламин/Сибунит удельная поверхность носителя существенно уменьшалась, дисперсность Pd становилась ниже, а каталитические свойства ухудшались. Согласно EXAFS/XANES и XPS данным природа атомарных Pd форм соответствует составу Pd-N₃ с Pd-N расстоянием – 2.03 Å, а степень окисления палладия – 2+. Таким образом, улучшение каталитических свойств в результате модифицирования поверхности Сибунита нитридом углерода было отнесено к образованию таких новых активных центров.

Работа выполнена при финансовой поддержке министерства науки и высшего образования РФ (проект FWUR-2024-0036).

Низкоразмерные наноструктуры для производства водорода

З.И. Попов¹, А.С. Орешонков^{1,2}

¹ *Институт биохимической физики им. Н.М. Эмануэля РАН, Москва, Россия*

² *Институт физики им. Л.В. Киренского СО РАН, Красноярск, Россия*

zipcool@bk.ru

DOI: 10.26902/Graphene-25-036

Прямое преобразование солнечной энергии в водородное топливо при разложении воды требует использования материалов-катализаторов, сочетающих в себе такие характеристики, как способность поглощать излучение в диапазоне солнечного спектра и обладающих высоким показателем времени рекомбинации носителей заряда. Поиск новых эффективных материалов-катализаторов, обладающих таким сочетанием характеристик, возможен среди низкоразмерных структур, в частности, двумерных материалов. Высокая удельная площадь поверхности, проявление размерных эффектов, возможность модификации свойств двумерных материалов и возможность формирования гетероструктур делают их перспективной формой для катализатора как для получения водорода из воды, так и для многих других реакций. В данной работе проведен скрининг обширного набора двумерных структур с целью выявления потенциально подходящих материалов для реализации S- и Z-схем расщепления воды. Для отобранных монослоёв произведено моделирование спектров комбинационного рассеяния света, полученные данные могут быть использованы для экспериментальной верификации структуры обсуждаемых катализаторов. Предложена новая динамически стабильная двумерная модификация состава In-Si-S-Se для проведения реакции фотокаталитического разложения воды.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ (грант № 25-73-20094).

**Тестирование нервной системы человека неинвазивными
носимыми сенсорами на основе графена**

И.В. Антонова^{1,2}, А.И. Иванов¹, А.А. Бузмакова^{1,2}, М.Б.Шавелкина^{1,3}

¹*Институт физики полупроводников им. А.В.Ржанова СО РАН,
просп. Акад. Лаврентьева 13, Новосибирск, Россия*

²*Новосибирский государственный технический университет,
просп. К. Маркса 20, Новосибирск, Россия*

³*Объединенный институт высоких температур РАН,
ул. Ижорская д. 13 стр. 2, Москва, Россия*

antonova@isp.nsc.ru

DOI: 10.26902/Graphene-25-037

Как свидетельствуют исследования, в современном мире подавляющее большинство людей живет на грани нервного срыва, что приводит к широкому распространению заболеваний, связанных с центральной или периферической нервной системой. Недуг не несет конкретной угрозы, но значительно понижает качество жизни, особенно в долгосрочной перспективе. Диагностирование периферической невропатии подчас бывает трудным в связи с вариабельностью симптомов. Неинвазивные подходы тестирования имеют большие перспективы и явные преимущества перед инвазивными; как с точки зрения их непосредственной применимости, так и с точки зрения возможности войти в комплекс персонализированной медицины «лаборатория на коже». Однако, неинвазивные методы анализа нервной системы развиваются относительно слабо.

Исследованы отклики тонких (10 нм) слоев композита графен : PEDOT : PSS, напечатанных на бумаге или нанесённых на лески из поликарбоната, при носке сенсора на запястье и в условиях непрерывного считывания сигнала. При изучении влияния пота на проводимость сенсорной структуры в условиях считывания сигнала с шагом 0.5-1.0 мин, было обнаружено появление ряда дополнительных пиков на кривой отклика сенсора длительностью от 1 до 12 мин, связанных с возбуждением нервной системы отдельных людей как ответ на определенные внешние факторы. Среди таких факторов были проколы пальца для измерения уровня глюкозы в крови, разговоры по телефону, езда на машине с препятствиями, умственная нагрузка, ожидание некоторых событий и др. Рост проводимости сенсора предположительно может быть связан с рядом биологически активных веществ (гормонов, например, кортизола, дефомина), выделяемых секретом потовых желез в ответ на психоэмоциональные стрессы (как негативные, так и позитивные). Отличительной особенностью пиков, связанных с нервной системой, является быстрая динамика откликов сенсора по сравнению с откликами на изменение уровня глюкозы.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ (грант № 25-19-20035).

**Исследование электрон-фононого взаимодействия
во фторированных/гидрированных углеродных нанотрубках
с одномерными пи-цепочками**

В.Л. Катков, В.А. Осипов

*Объединенный институт ядерных исследований, ул. Жолио Кюри 6,
Дубна, Московская область, Россия*

katkov@theor.jinr.ru

DOI: 10.26902/Graphene-25-038

Ранее нами было исследовано влияние температуры на изменение запрещенной зоны в углеродных нанотрубках, покрытых фтором или углеродом [1]. Полное фторирование или гидрирование приводит к образованию квазиодномерных углеродных π -цепочек, наличие которых обуславливает специфическую зависимость запрещенной зоны от температуры. Естественным продолжением этого исследования является вычисление для этих структур подвижности носителей заряда, ограниченной фононами с целью, в том числе, оценки их применимости в качестве материала для наноэлектроники. Данные расчеты были сделаны в приближении сильной связи с использованием пакета DFTB+ (расчет электронных и фононных спектров), а также классического подхода для вычисления констант электрон-фононного взаимодействия в неортогональном базисе. Было обнаружено, что подвижность электронов в таких структурах определяется самой низколежащей энергетической веткой электронного спектра и сильно зависит от того является ли она вырожденной или нет. Во всех исследуемых структурах подвижность электронов обнаружена невысокой. Для разных конфигураций допирования и диаметров трубки эта величина варьируется в пределах 10-1000 [$\text{cm}^2/(\text{V s})$]

[1] Катков В.Л., Осипов В.Ф. //Письма в ЖЭТФ. 2023. Т. 118. № 10. С. 754.

**Терагерцовые метаструктуры на основе углеродных наноматериалов:
от синтеза до оптических свойств**

О.В. Седельникова¹, Д.В. Городецкий¹, О.Г. Поддубская², Н.И. Волинец², В.И. Сысоев¹,
С.А. Максименко², Л.Г. Булушева¹, А.В. Окотруб¹

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

²Институт ядерных проблем Белорусского государственного университета,
ул. Бобруйская 11, Минск, Беларусь
o.sedelnikova@gmail.com

DOI: 10.26902/Graphene-25-039

Впервые экспериментально полученное в начале прошлого века [1], терагерцовое (ТГц) излучение открыло новые перспективы для применения в медицине, системах неразрушающего контроля, при разработки нового поколения средств коммуникации и высокоскоростной передачи данных (5G и 6G систем). Однако интенсивное развитие данного спектрального диапазона связано не только с совершенствованием генераторов и детекторов, но и с поиском передовых решений и подходящих материалов для эффективного управления фазово-поляризационными свойствами и пространственным распространением ТГц волн [2]. В этом контексте углеродные материалы (графит, графен, углеродные нанотрубки, алмаз и т.д.), а также композиты на их основе, представляют собой перспективную платформу для создания дешевых и компактных квазиоптических элементов ТГц фотоники, электрофизические свойства которых могут быть легко адаптированы для решения конкретных задач. Возможность термической модификации углеродных структур под воздействием импульсного лазерного излучения, прецизионно формируя области с различными оптическими, электрическими и химическими свойствами, открывает широкие перспективы применения метода лазерной абляции.

В работе представлены результаты исследования ТГц свойств метаматериалов, созданных на основе вертикально ориентированных массивов многослойных углеродных нанотрубок [3, 4], фторированного графена [5] и поликристаллических алмазных пленок [6]. Особое внимание уделено лазерно-индуцированным процессам модификации структуры и химического строения углеродных материалов при воздействии сфокусированного импульсного лазерного излучения. Рассмотрены основные физические эффекты, обуславливающие возникновение резонансных явлений в спектрах ТГц пропускания углеродных метаструктур. Анализ этих эффектов позволит оптимизировать параметры разработанных элементов для достижения заданных оптических характеристик. Обсуждаются перспективы применения углеродных метаструктур для создания компонентов ТГц фотоники, таких как поляризаторы, эффективные поглотители и частотные фильтры.

Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ (грант № 22-72-10097-П), экспериментальное исследование ТГц свойств гибких подложек выполнено при финансовой поддержке фонда БРФФИ (проект № Ф25МЭ-005).

[1] Glagolewa-Arkadiewa A. // Nature. 1924. V. 113.

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

[3] Gorokhov G.V. et al. // Nanotechnology. 2020. V. 31. P. 255703.

[4] Sedelnikova O.V. et al. // Materials. 2021. V. 14. P. 3275.

[5] Valynets N.I., Paddubskaya A.G., Sysoev V.I. // Nanotechnology. 2023. V. 34. P. 185703.

[6] Paddubskaya A.G., Sedelnikova O.V., Gorodetskiy D.S. // SSRN. 2024.

**Усиление эффектов двойного лучепреломления в структурах,
содержащих слои графена и нематика**

К.Г. Батраков¹, Н.И. Волинец¹, Н.Н. Дубинецкий¹, О.Г. Поддубская¹, А.Л. Маргарян²,
Н.Г. Акопян², В.К. Абрамян²

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

²Центр полупроводниковых приборов и нанотехнологий, Ереванский государственный
университет, ул. Алека Манукяна 1, Ереван, Армения
kqbatrakov@mail.ru

DOI: 10.26902/Graphene-25-040

Электродинамические свойства нематиков могут быть изменены путем приложения внешнего электрического поля. Это позволяет использовать нематики в качестве базовых элементов в модуляторах, фильтрах, детекторах электромагнитного излучения и других устройствах, где требуется поворот вектора поляризации, преобразование линейной в круговую поляризацию и плавное (дискретное) переключение режимов этих преобразований. Бурное развитие и освоение терагерцового (ТГц) диапазона обусловило поиск новых материалов, на основе которых могут быть реализованы четверть- и полуволновые пластинки. Такие пластинки могут быть созданы на основе жидкокристаллических ячеек с нематиком. Однако, одной из возникающих проблем является недостаточность размера рабочей области нематика. Отличие показателей преломления между обыкновенной и необыкновенной волнами для типичных нематиков составляет $\sim 0.1 - 0.2$. При этом, электродинамические свойства ячейки с нематиком относительно легко регулируется электродами при ее толщине, не превышающей 150 – 200 мкм, иначе распределение вектора директора вдоль глубины будет неоднородным. Такие параметры являются недостаточными для создания $\pi/2$, тем более π разности фаз между двумя волнами. Еще одной проблемой в ТГц области является довольно большое поглощение материалов, используемое в нематических ячейках, в частности, поглощение на ИТО электродах. Одним из способов решения этих проблем может быть использование резонансной схемы Фабри-Перо, рассматриваемой в данной работе. В этом случае реализация разности набега фаз $\pi/2$ и π достигается благодаря многократному прохождению волн через ячейку с нематиком. Поглощение уменьшается за счет использования в качестве управляющих электродов вместо ИТО тонких слоев пиролитического углерода (или графена) [1]. Дополнительное уменьшение поглощения также может быть достигнуто созданием конфигурации, при которой положению электродов будут соответствовать узлы стоячей волны, возникающей в резонаторе Фабри-Перо.

Работа выполнена при финансовой поддержке БРФФИ (проект № Ф25МЭ-005) и гос. программы республики Беларусь «Фотоника и электроника для инноваций».

[1] Batrakov K.G. *et al.* // Physica Scripta. 2025. V. 100. P. 015510.

Формирование полупроводниковых и сенсорных устройств методом лазерного паттернирования оксида графена

К.А. Раянова¹, С.И. Бабенко¹, А.С. Брылева¹, К.В. Канаев¹, О.А. Кудрявцев¹,
Р.Р. Нигаматуллина¹, А.Д. Судакова¹, А.В. Щегольков¹, И.А. Комаров^{1,2}

¹Московский политехнический университет, ул. Б. Семеновская 8, Москва, Россия

²ФИЦ проблем химической физики и медицинской химии РАН, просп. Акад. Семенова 1,
Черноголовка, Россия
master_kom@mail.ru

DOI: 10.26902/Graphene-25-041

Развитие современной электроники предусматривает, в частности, разработку гибких устройств. В частности, одним из путей развития современной потребительской электроники в виде смартфонов и носимых смарт устройств предполагает создание гибких дисплеев, печатных плат, датчиков и т.д. В связи с этим возникает потребность в новых материалах для гибкой электроники. Одним из перспективных классов материалов, применяемых в гибкой и органической электронике, являются производные графена, в частности оксид графена (ОГ) [1] и восстановленный оксид графена (ВОГ) [2]. При этом управление электронными свойствами производных графена возможно за счет изменения количества функциональных групп на их поверхности [3], что в свою очередь ведет к изменению ширины запрещенной зоны в данных материалах. Существуют различные методы восстановления ОГ, однако наиболее многообещающим для локальной модификации является применение лазеров.

В настоящем исследовании использовался лазер с длиной волны 405 нм. Пленка ОГ на поверхности ПЭТ подложек формировалась методом центрифугирования (100 мкл, 1000 об/мин). В зависимости от значения флюенса (от 15 до 60 мДж/см²) лазерного излучения наблюдаются отличия в ИК и КР спектрах. В частности, следует отметить, что при малых значениях флюенса порядка 25 мДж/см² наблюдается присутствие пика ~1730 см⁻¹ на фурье-ИК спектрах, что говорит о присутствии карбоксильных и карбонильных функциональных групп, что важно для задач сенсорики, т.к. позволяет связывать с ВОГ различные малые органические и биомолекулы. При этом в КР спектре наблюдается размытый 2D пик, содержащий различные овертоны, что говорит о малой структурированности пленки.

При увеличении флюенса наблюдается увеличение структурированности пленки, что следует из увеличения интенсивности 2D пика (~ 2700 см⁻¹), а также понижения сопротивления пленки, при этом максимум достигается при флюенсе порядка ~ 48 мДж/см². При флюенсе более 60 мДж/см² наблюдается существенная деформация пленки ОГ, что свидетельствует о перегреве пленки. Таким образом показано, что применение относительно недорогого лазера с микросекундной длиной импульса тем не менее позволяет производить управление свойствами пленки оксида графена и обеспечивать как слабое восстановление, что, например, может быть использовано в устройствах электроники и сенсорной технике, а также при необходимости дополнительной функционализации пленки восстановленного ОГ различными молекулами.

Работа выполнена при финансовой поддержке Московского Политехнического университета в рамках гранта им П.Л. Капицы.

- [1] Chendake Y. *et al.* Graphene: a promising material for flexible electronic devices In: S.K. Patel, S.A. Taya, S. Das, K. Vasu Babu (eds) Recent advances in graphene nanophotonics advanced structured materials// Springer, Cham, 83–118 (2023)
- [2] Chen H. *et al.* // Chem. Eng. J. 2023. V. 464. P. 142576.
- [3] Das P. *et al.* // Scientific Reports. 2024. V. 14. P. 294.

Можно ли увидеть C=C связь в ИК спектре оксида графена?

В.В. Бруско, А.А. Ханнанов, А.М. Димиев

*Казанский (Приволжский) федеральный университет,
Химический институт им. А.М. Бутлерова, ул. Кремлевская 29/1, Казань, Россия
vbrusko@kpfu.ru***DOI: 10.26902/Graphene-25-042**

Оксид графена (ОГ) является двумерным материалом, в котором участки нетронутого графена соседствуют с доменами, насыщенными кислородсодержащими функциональными группами. Химическая модификация этих функциональных групп позволяет получать материалы с требуемыми свойствами. Метод инфракрасной спектроскопии является недорогим и надежным экспресс-методом контроля полученных материалов. Его успешное использование подразумевает точное отнесение полос колебаний функциональных групп и воды в спектре ИК. Самая многочисленная группа в составе ОГ это двойная C=C связь и многие исследователи без сомнений находят эту полосу в районе 1580-1620 см⁻¹. Однако метод ИК имеет свои ограничения и в спектре проявляются только те колебания, при которых меняется дипольный момент. Симметричные C=C связи таким свойством не обладают, в спектре исходного графита и в графене эти полосы закономерно отсутствуют. Было показано, что полоса при 1610 см⁻¹, которую чаще всего принимают за колебания C=C связи, относится к деформационным колебаниям воды [1; 2]. В «классических» ОГ по Хаммерсу (Х-ОГ) (с числом эквивалентов не менее 3) и ОГ по Броди (Б-ОГ) видна только полоса воды, полосы C=C связи не наблюдаются [3].

Однако полоса C=C связи все-таки может проявиться в спектре ОГ, но только при следующих ограничениях. Эта полоса видна в Х-ОГ и Б-ОГ при малых, недостаточных степенях окисления (для Х-ОГ не более 2 эквивалентов) [3, 1] и наблюдается в виде самостоятельной полосы или плеча. Нужно отметить, что такие недостаточно окисленные Х-ОГ в воде не расслаиваются и их следует скорее отнести к оксидам графита, нежели оксидам графена. Другой случай проявления полосы C=C в спектре ОГ наблюдается для частично восстановленного Х-ОГ (например, с помощью раствора HBr) [3].

Причина отсутствия полосы C=C в исходном графите очевидна, а её появление в ходе окисления и последующее исчезновение на наш взгляд объясняется следующим. В ходе окисления возле двойных C=C связей появляются функциональные группы, что приводит к нарушению симметрии и появлению дипольного момента. При дальнейшем протекании процесса окисляются не «свежие» двойные связи из нетронутых доменов, а наоборот активированные, по соседству с функциональными группами. Это приводит к исчезновению полос C=C связей в «классических» ОГ и согласуется с известной картиной строения ОГ: окисленные и графеновые домены раздельно. Схожая картина наблюдается и при частичном восстановлении ОГ, когда двойные C=C связи формируются в пределах окисленных доменов, окружены функциональными группами и обладают дипольным моментом.

Таким образом, в ИК спектрах стандартно окисленных оксидов графена по Хаммерсу или по Броди полоса C=C не наблюдается, но может появиться в недоокисленных оксидах графита или в частично восстановленных ОГ.

[1] Szabó T. *et al.* // Chem. Mater. 2006. V. 18. № 11. P. 2740.

[2] Dimiev A.M., Alemany L.B., Tour J.M. // ACS Nano. 2013. V. 7. № 1. P. 576.

[3] Brusko V., Khannanov A., Rakhmatullin A., Dimiev A.M. // Carbon. 2024. V. 229. P. 119507.

Топохимические зондовые реакции для анализа кислотно-основных свойств поверхности оксидов графита методом ИК-НПВО спектроскопии

И.В. Михеев, Д.-М.В. Ратова, Е.Ю. Жукова, А.В. Каплин, С.В. Смирнова,
М.В. Коробов, М.А. Проскурнин

МГУ имени М.В.Ломоносова, Ленинские горы 1 стр.3, Москва, Россия

mikheev.ivan@gmail.com

DOI: 10.26902/Graphene-25-043

Развитие физико-химических методов анализа, начиная с 60-х годов XX века, показывает экспоненциальный рост числа публикаций по теме анализа поверхности с общим числом публикаций 2.6 млн (на май 2025; по БД SciFinder). В области анализа поверхности оксида графита существует ряд нерешенных вопросов по оценке количества функциональных групп как отдельных, так и общих, дефектов структуры, а также окислительного мусора — высокоокисленные низкомолекулярные фракции.

Оценка поверхностных групп важная задача для биомедицинских приложений, потому что кислородосодержащие группы могут участвовать в свободно-радикальных процессах и выступать в роли перехватчика радикалов (англ. free radical scavenger). Как показывает практика сравнение образцов наноматериалов, например, по токсичности или иным физико-химическим свойствам проводят в категориях молярных концентраций, а не массовых. Из-за отсутствия четкой молекулярной формулы $C_xH_yO_z$ получение молярной концентрации оксида графена, например, в водных дисперсиях, крайне затруднено. Поэтому оценка количества потенциальных реакционных центров, О-групп, позволит приблизиться к стандартизации подхода оценки качества продукта. Вторая трудность в химии оксида графена связана с его негомогенностью по фазовому (фракционному) составу. Зачастую более маленькая фракция обладает большей степенью окисленности в сравнении с интегральными образцами (bulk), а также другим химическим составом.

В работе рассматривается возможность использования топахимических реакций для характеристики кислотно-основных свойств (оценки активных центров) поверхности оксидов графита с применением молекул-зондов, активных в ИК области. Преимущества метода ИК-НПВО спектроскопии заключаются в возможности регистрации спектров в широком температурном диапазоне — от комнатных до 215°C. В качестве молекулярных зондов, которые сорбируются на твердый оксид графена из насыщенной паровой фазы, выбраны молекулы с N-, P-, S-, O- активными группами: доноры протонов (кислотные соединения), основания Льюиса (азотсодержащие амины), полярные апротонные растворители, сильные электрофилы, ароматические соединения. Эти молекулы чувствительны к различным типам кислотных центров, Льюиса и Бренстеда.

Результаты разделены по группам с высокой сорбцией (> 5 ммоль/гГО), средней (1–5 ммоль/г, низкой (< 1 ммоль/гГО). В докладе будет показано влияние химической природы зонда, условий сорбции и степени очистки образцов на форму и интенсивность ИК-полос. Показано, что взаимодействие зондов с поверхностью приводит к появлению новых полос и сдвигу характерных полос поглощения, что позволяет дифференцировать природу адсорбционных центров. Лучше всего взаимодействуют мелкие, основного характера молекулы с доступными атомами азота (пирролидин, морфолин). Полярные растворители тоже сорбируются в значительной степени, что указывает на присутствие полярных и водород-связывающих групп. Низкая сорбция альдегидов, кетонов и ангидридов говорит о слабом электрофильном или кислотном взаимодействии с поверхностью. Подход продемонстрировал работоспособность на коммерческих и синтезированных образцах оксидов графита. Результаты сорбционных экспериментов и ИК-анализа позволили оценить долю активных участков поверхности. Полученные данные расширяют возможности ИК-зондового анализа для определения поверхностной концентрации групп в углеродных наноматериалах.

Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ (грант № 24-73-10012).

**Гибкие мемристоры и многоуровневые схемы на их основе
из фторированного графена**

А.И. Иванов¹, И.В. Антонова^{1,2}

¹*Институт физики полупроводников им. А.В.Ржанова СО РАН,
просп. Акад. Лаврентьева 13, Новосибирск, Россия*

²*Новосибирский государственный университет, ул. Пирогова 1, Новосибирск, Россия
art.iv.il@mail.ru*

DOI: 10.26902/Graphene-25-044

Развитие искусственного интеллекта и хранение данных высокой плотности всё больше опираются на достижения в нейроморфных вычислениях, а разработка устройств, способных одновременно хранить и обрабатывать информацию, играет важное значение.

Мемристор – устройство, способное переключаться и сохранять высокоомные сопротивления (HRS) или низкоомные сопротивления (LRS), хорошо подходит для создания нейроморфных вычислительных устройств, поскольку его структура и механизм работы аналогичны тем, что наблюдаются в синапсах человеческого мозга. Одним из эффективных способов решения этой проблемы является использование новых мемристоров с многоуровневыми состояниями сопротивления.

В настоящей работе показано, что на основе композитного материала, состоящего из наночастиц V_2O_5 капсулированных фторированным графеном, формируются мемристоры с биполярными переключениями и рекордно большой величиной изменения проводимости ON/OFF $\sim 10^9$ с характерным временем переключения около 30 нс и числом циклов переключений $\sim 2 \times 10^6$ без изменения соотношения токов в низкоомном и высокоомном состояниях. Отдельные наночастицы ядро-оболочка, состоящие из V_2O_5 размером $\sim 5-7$ нм, капсулированных фторированным графеном, демонстрируют эффект резистивных переключений до 3-5-ти порядков, количество переключений составляло $\sim 10^4$, и было ограничено возможностями измерительного зонда. Показано, что гибкость полностью напечатанных тестовых мемристорных структур на основе фторированного графена с наночастицами пентоксида ванадия (ФГ/ V_2O_5), ограничена деформациями 2%.

Показано, что печатные многоуровневые структуры на основе фторированного графена с поливиниловым спиртом демонстрируют эффект резистивных переключений величиной до 8 порядков с стабильностью до деформаций $\sim 7\%$. На величину эффекта переключений влияет длительность температурной обработки, общая толщина мемристорного слоя и глубина залегания мемристора, относительно поверхности структуры. Попарное замыкание контактов гибких схем «и» позволило наблюдать до четырех логических мемристорных состояний.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ (грант № 25-19-20035).

Влияние добавок многостенных углеродных нанотрубок на структуру и прочность цементного камня и бетонов

С.И. Мосеенков, А.В. Заворин, В.Л. Кузнецов
Институт катализа им. Г.К. Борескова СО РАН,
просп. Акад. Лаврентьева 5, Новосибирск, Россия
moseenkovn@catalysis.ru

DOI: 10.26902/Graphene-25-045

Бетоны являются наиболее широко распространенными материалами в жизни человечества, используемыми в гражданском и промышленном строительстве, сооружении транспортных магистралей, мостов. В силу этого возникают постоянные задачи, связанные с улучшением их прочностных характеристик, устойчивости к воздействию воды и различных агрессивных сред, термической устойчивости и проч. Наиболее перспективные направления улучшения характеристик бетонов и их эксплуатационных свойств связаны с модификацией их структуры за счет введения различных типов добавок. Как и для большинства композитных материалов, наиболее перспективные направления улучшения свойств является использование наноразмерных добавок, существенным образом влияющих на структуру бетонов. Свойства получаемых композиционных материалов могут значительно изменяться по сравнению с исходными матрицами за счет введения даже небольших количеств наноразмерных добавок в силу высокого отношения площади их поверхности к объему. Одним из наиболее перспективных типов таких добавок являются наноразмерные углеродные материалы (НУМ, в том числе: углеродные нанотрубки, нановолокна, малослойные графеноподобные материалы). В частности, описаны эффекты их существенного воздействия на эксплуатационные характеристики бетонов: их плотность и прочность, пористость, водопоглощение, устойчивость к высоким и низким температурам и другие.

В данной работе проведено комплексное исследование влияния добавок многостенных углеродных нанотрубок (УНТ) на структуру и механическую прочность цементного камня и получаемого на его основе бетона. Для этого проведено определение наиболее перспективных НУМ для модификации цементов и бетонов в режиме скрининга, получены зависимости изменения прочностных характеристик цементного камня и распределение добавок МУНТ в цементной массе в зависимости от типа и характеристик (диаметр, аспектное отношение, функциональный состав), их содержания в цементном камне, водоцементного отношения и используемого поверхностно-активного вещества для стабилизации МУНТ.

Было установлено, что введение МУНТ в воду затворения цемента позволяет значительно увеличить прочность получаемого цементного камня, как на изгиб, так и на сжатие. Так, прочность исходного цементного камня, изготовленного из цемента марки М400, согласно ТУ должен составлять 5.5 МПа и 32.5 МПа на изгиб и на сжатие соответственно. Добавление 0.5 масс.% суперпластификатора Sika к цементу позволяет увеличить прочность цементного камня до 16.5 МПа (в 3 раза) и до 85.2 МПа (в 2.6 раза) на изгиб и на сжатие, соответственно. Введение дополнительно 0.1 масс.% МУНТ позволяет дополнительно увеличить прочность цементного камня до 25.1 МПа (в 4.6 раза) и до 126.5 МПа (в 3.9 раза) при водоцементном отношении 0.33, и до 28 МПа и 144.4 МПа (рост в 5.1 и 4.4 раза) при водоцементном отношении 0.22.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (грант № 24-23-20103 от 12.04.2024) и Правительства Новосибирской области (грант № р-95 от 22.03.2024).

Графен, локально осажденный в верхний интерфейс структур Pt/Co/Pt и Pd/Co/Pd

И.И. Куркина¹, А.В. Давыденко², А.А. Турпак², Н.Н., Черноусов²,
Ж.Ж. Намсараев², А.С. Пашенко², А.А. Алексеев¹

¹Северо-Восточный федеральный университет им. М.К. Аммосова,
ул. Белинского 58, Якутск, Россия

²Дальневосточный федеральный университет, ул. Аякс 10,
о. Русский, Владивосток, Россия

ii.kurkina@s-vfu.ru

DOI: 10.26902/Graphene-25-046

Одной из основных задач спинтроники является разработка каналов для спинового транспорта с увеличенной спиновой диффузионной длиной (L_{sf}) и длительным временем жизни спинов (τ_{sf}). Графен может соответствовать этим требованиям даже при комнатной температуре, теоретически L_{sf} может достигнуть микрометров из-за малой спиновой релаксации, а τ_{sf} – 100 нс. В данной работе мы внебрили графен в верхний интерфейс структур Pd/Co/Pd и Pt/Co/Pt между ферромагнитным кобальтом и тяжелым металлом Pd(Pt) в высоком вакууме, чтобы установить влияние графена на магнитные свойства структур и спиновую прозрачность интерфейсов.

Структуры с составом Si(111)/Cu/Pd/Co/Pd и Si/SiO₂/Pt/Co/Pt были изготовлены с помощью молекулярно-лучевой эпитаксии и магнетронного распыления соответственно. Были изготовлены 2 типа образцов со слабой и сильной перпендикулярной магнитной анизотропией (ПМА), в которых энергия ПМА была меньше и больше 10^5 Дж/м³ соответственно. В верхний интерфейс между Co и тяжелым металлом в процессе их изготовления локально внедрялись чешуйки графена (Gr) (2-5 нм) без выгрузки из вакуумных комплексов установок. В результате получались локальные структуры Si(111)/Cu/Pd/Co/Gr/Pd и Si/SiO₂/Pt/Co/Gr/Pt. В образцах со слабой ПМА энергия ПМА на участках пленок, включающих чешуйки графена, не отличалась от энергии ПМА на участках без чешуек графена, что было подтверждено магнитометром на основе магнитооптического эффекта Керра, измеряющего магнитный сигнал с локальной области пленок диаметром меньше 5 мкм. На основе сдвига петель аномального эффекта Холла в образцах с сильной ПМА была произведена оценка эффективности передачи углового момента (spin-orbit torque или SOT-эффект) от свободных электронов в тяжелом металле в слой ферромагнетика.

В поликристаллических образцах Pt/Co(0,5 нм)/Pt SOT-эффект наблюдается в случае большого различия толщин нижних и верхних слоев Pt вследствие зависимости спиновой аккумуляции на нижних и верхних интерфейсах Co с Pt от толщин слоев Pt. Внедрение чешуек графена между слоями Co и верхними слоями Pt приводит к значительному увеличению измеряемого отношения эффективного магнитного поля, действующего в направлении z на магнитный слой, к постоянному зарядовому току $H_{z, \text{эфф}} / I$ по сравнению с образцами того же состава слоев, но без графеновых чешуек. Данные результаты нельзя объяснить только изменением спиновой прозрачности верхнего интерфейса Co/Pt при внедрении в него графена. Следует рассматривать комплексное влияние на SOT-эффект в исследуемых структурах следующих факторов: изменение спиновой прозрачности Co/Pt интерфейсов, изменение полного сопротивления структур и перераспределение токов при внедрении графена в верхний интерфейс Co/Pt. Установлено, что независимо от толщин слоев Pd и наличия графеновых чешуек между слоями Co и верхними слоями Pd значимого SOT-эффекта в структурах Pd/Co/Gr/Pd не наблюдается.

Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ (№ 23-79-00065, <https://rscf.ru/project/23-79-00065/>). При выполнении работы использовалось оборудование междисциплинарного центра коллективного пользования в области нанотехнологий и новых функциональных материалов ДВФУ (ЦКП ДВФУ, Владивосток, Россия).

**Учет влияния подложки в первопринципных расчетах
комбинационного рассеяния в монослое MoS₂ на кварце**

Н.Л. Мацко, Д.А. Шохонов, В.А. Осипов

*Объединенный институт ядерных исследований, ул. Жолио Кюри 6,
Дубна, Московская область, Россия*

matsko@theor.jinr.ru

DOI: 10.26902/Graphene-25-047

В рамках DFT изучается комбинационное рассеяние (КР) в монослое MoS₂ на кварцевой подложке. Рассматривается несколько типов интерфейса MoS₂/SiO₂, которые могут реализовываться на практике. Первый тип интерфейса соответствует случаю "плотной" поверхности SiO₂. Далее рассматриваются интерфейсы с различными дефектами шероховатостями на поверхности кварца, а также интерфейс при наличии химических связей S-O. Расчеты показывают, что в случае Ван-дер-Ваальсова взаимодействия подложка слабо влияет на КР в MoS₂, за исключением некоторых случаев с ярко выраженными дефектами поверхности на SiO₂. Влияние подложки при наличии химических связей S-O проявляется гораздо сильнее, приводя к заметному расщеплению и смещению E и A пиков КР в монослое MoS₂.

[1] Matsko N.L., Shohonov D.A., Osipov V.A. Surf. Sci. 2025. V. 757. P. 122725.

Моделирование электронных возбуждений и структурной трансформации графита при его облучении высокоэнергетическими ионами Хе методом TDDFT

С.В. Ерохин¹, С.А. Коган², П.Б. Сорокин¹

¹*Национальный исследовательский технологический университет «МИСИС»,
Ленинский просп. 4, Москва, Россия*

²*Московский физико-технический институт, Институтский переулок 9 стр.3,
Долгопрудный, Россия
erohin.sv@misis.ru*

DOI: 10.26902/Graphene-25-048

Возможность формирования алмазных структур в графене представляет особый интерес в связи с потенциалом их применения в различных областях от электроники и оптики до биомедицины. Облучение многослойного графена тяжёлыми ионами демонстрирует возможность формирования алмазных структур нанометрового размера с поверхностями, не подверженными графитизации [1].

На данный момент отсутствует теоретическое обоснование появления зародышей алмаза в графитовых слоях нанометровой толщины. Классические термодинамические подходы предсказывают крайне невыгодную энергетику формирования таких структур из-за наличия напряжений на границах раздела и большой доли свободной поверхности, которая дестабилизирует алмазную фазу и обычно ведёт к графитизации. Объяснить фазовую трансформацию многослойного графита в алмаз при облучении может помочь теория фотоиндуцированного фазового превращения, в которой предполагается изменение баланса между фазами при возбуждении электронных уровней.

Для описания таких процессов был применён подход нестационарной теории функционала электронной плотности (TDDFT). На первом этапе работы было проведено моделирование облучения многослойного графена высокоэнергетичным ионом Хе. Затем предложены модели структур, которые могут описать наблюдаемый фазовый переход. Далее с помощью метода TDDFT рассмотрены одноэлектронные возбуждения в изучаемых углеродных кластерах со смешанными типами связей sp^2 - sp^3 . Показано наличие переходов, которые дестабилизируют sp^2 связи и могут вызывать экспериментально наблюдаемое формирование зародышей алмаза в графитовых плёнках нанометровой толщины.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ (грант № 24-79-10299).

[1] Tomilin L.F. *et al.* // Carbon. 2024. V. 220. P. 118832.

**Атомистическое моделирование процесса синтеза
Cu/графеновых частиц в плазменном потоке**

К.А. Крылова¹, М.Б. Шавелкина², Ю.А. Баимова¹

¹*Институт проблем сверхпластичности металлов РАН, ул. Халтурина 39, Уфа, Россия*

²*Объединённый институт высоких температур РАН,*

ул. Ижорская 13, стр. 2, Москва, Россия

bukreevakarina@gmail.com

DOI: 10.26902/Graphene-25-049

Композиты на основе графена с медными частицами обладают высокими тепловыми и механическими свойствами. Однако свойства таких композитов зависят от условий синтеза и состава компонентов. Синтез Cu/графеновых композитов в плазменной струе является одним из перспективных способов получения [1]. В данной работе с помощью молекулярно-динамического моделирования изучен процесс образования наночастиц Cu/графен в условиях плазменного потока.

Молекулярно-динамическое моделирование проводилось с помощью программы LAMMPS. В упрощенной модели синтеза Cu/графенового композита в условиях плазмы взаимодействие частиц графена и меди осуществлялось при температуре 2500–3000 К и скорости от 1 до 9 км/с. Наночастица меди летела в направлении графеновой чешуйки (ГЧ) с высокой скоростью и соударялась с выпуклой и вогнутой стороной графеновой чешуйки. Выбор такой высокой температуры и скоростей связан с результатами наших предыдущих исследований синтеза графена в плазменной струе [1,2].

В ходе моделирования установлено, что при столкновении наночастиц меди с графеновой чешуйкой реализуется один из трех типов взаимодействия: прилипание, отталкивание и разрыв. Частица меди прилипает к ГЧ при её скорости менее 1 км/с. Увеличение скорости движения частицы Cu приводит к ее отталкиванию от графеновой поверхности. Однако, разрыв графенового листа наблюдается при разных скоростях движения частицы Cu и зависит от кривизны графенового листа. При взаимодействии с вогнутой стороной графенового слоя разрыв ковалентных связей происходит, когда скорость частицы меди достигает 7 км/с. В то же время, при контакте с выпуклой стороной чешуйки для разрыва углеродных связей требуется скорость наночастиц не менее 9 км/с. При увеличении размера частицы Cu и графеновой чешуйки наблюдались только два механизма взаимодействия – отталкивание с последующим заворачиванием медной частички в графеновую чешуйку и разрыв графеновой чешуйки. Отметим, что увеличение размеров приводит к снижению скоростей взаимодействия.

В работе установлено, что скорость медных частиц, их размер и кривизна графеновых чешуек играют важную роль в процессе синтеза композитных частиц Cu/графен. Полученные результаты помогают оптимизировать процесс синтеза таких наноструктур и могут быть использованы для разработки инновационных технологий в области наносинтеза композитных материалов на графеновой основе.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант № 20-72-10112- П).

[1] Shavelkina M.B. *et al.* // Plasma Sources Sci. Technol. 2020. V. 29. № 2. P. 025024.

[2] Shavelkina M.B. *et al.* // Appl. Surf. Sci. 2025. V. 689. P. 162523.

Молекулярная динамика с машинно-обучаемыми потенциалами для описания динамики дефектов в графене

Н.Д. Орехов

Московский физико-технический институт, Институтский переулок 9 стр.3,

Долгопрудный, Россия

nikita.orekhov@gmail.com**DOI: 10.26902/Graphene-25-050**

Классическая молекулярная динамика (МД) — один из немногих вычислительных методов, позволяющих моделировать углеродные материалы с атомарной точностью на наносекундных временных масштабах. Однако разработка универсального межатомного потенциала для углерода долгое время оставалась сложной задачей из-за большого разнообразия его аллотропных форм. Модели потенциалов, существовавшие ещё несколько лет назад, не обеспечивали достаточной точности [1]. К счастью, недавние достижения в области межатомных потенциалов, основанных на методах машинного обучения, позволили существенно повысить точность моделирования аморфного углерода [2], алмаза [3] и более экзотических углеродных фаз [4].

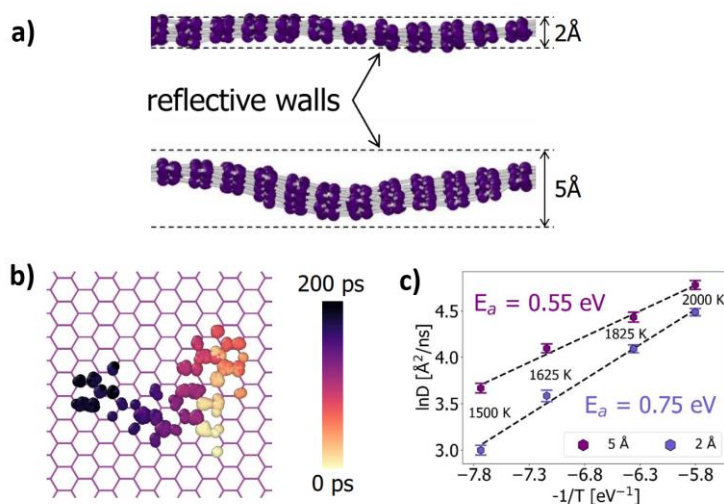


Рис. 1. (а) Схема расчетной ячейки с графеном, зажатом между отражающими стенками.

(б) Траектория одиночной вакансии. (с) Зависимость между коэффициентом диффузии вакансии и температурой.

В данной работе с использованием одного из таких потенциалов нами была исследована взаимосвязь между волнами на поверхности графена (так называемыми *graphene intrinsic ripples* [5]) и процессом диффузии одиночной вакансии в ходе длительных (до 0,5 нс) МД-расчётов (Рис. 1). Показано, что игнорирование коллективных движений графенового листа приводит к завышенной оценке энергетического барьера миграции — на десятки процентов. Полученные результаты могут объяснить значительный разброс литературных данных по величине этого барьера, который, согласно различным источникам, варьируется от 0,5 до 1,4 эВ. В докладе также будут рассмотрены общие возможности современных машинно-обучаемых межатомных потенциалов применительно к предсказанию свойств углерода.

Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ (грант № 25-73-20143).

- [1] Orekhov N., Ostroumova G., Stegailov V. // Carbon. 2020. V. 170. P. 606.
- [2] Orekhov N., Logunov M. // Carbon. 2022. V. 192. P. 179.
- [3] Zelenina A. *et al.* // Diam. Relat. Mater. 2024. V. 148. P. 111427.
- [4] Alekseev D. *et al.* // Comput. Mater. Sci. 2025. V. 248. P. 113572.
- [5] Fasolino A. *et al.* // Nat. Mater. 2007. V. 6. P. 858.

Точечные дефекты в алмазах: теоретический анализ

К.В. Ларионов, С.В. Ерохин, М.О. Климова, П.Б. Сорокин

Национальный исследовательский технологический университет «МИСИС»,

Ленинский пр. 4 стр. 1, Москва, Россия

kv.larionov@misis.ru

DOI: 10.26902/Graphene-25-051

Благодаря ряду свойств кристалл алмаза мог бы стать отличным кандидатом для создания электроники нового поколения на смену традиционным кремниевым устройствам. Однако его реальное применение невозможно ввиду отсутствия необходимых стабильных уровней в широкой запрещенной зоне (5.47 эВ). Тем не менее, благодаря ряду теоретических и экспериментальных работ появилась новая возможность – создание двухмерного алмаза, или алмазана [1] – тонкой алмазной пленки, стабилизированной за счет функционализации поверхности (например, водородом). Этот материал демонстрирует прямую запрещенную зону 4.1 эВ в сочетании с низкой эффективной массой [2,3]. В то же время вопрос формирования уровней в запрещенной зоне за счет дефектов для создания необходимых энергетических переходов остается малоизученным.

В данной работе методами *ab initio* изучена энергетика формирования точечных дефектов в гидрированном алмазана. Рассмотрены различные дефекты замещения и вакансии, в том числе для случая заряженных состояний. Выполнен анализ изменений в зонной структуре алмазана в присутствии дефектов. Полученные результаты значительно расширяют сведения, необходимые для создания полупроводниковых устройств на основе алмазоподобных структур.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант № 24-79-10299).

[1] Chernozatonskii L.A. *et al.* // JETP Lett. 2009. V. 90. № 2. P. 134.

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

[3] Erohin S.V. *et al.* // Small. 2020. V. 16. № 47. P. 2004782.

Углеродные материалы для емкостных электрохимических устройств**Н.Ф. Уваров, О.А. Подгорнова, А.С. Улихин***Институт химии твердого тела и механохимии СО РАН,**ул. Кутателадзе 18, Новосибирск, Россия**uvarov@solid.nsc.ru***DOI: 10.26902/Graphene-25-052**

Известно, что процессы накопления заряда, протекающие при наложении внешнего электрического поля в любых электрохимических устройствах, сопровождаются образованием двойного электрического слоя на электродах. Процесс образования такого слоя происходит гораздо быстрее, чем протеканием электрохимических реакций, которые обычно лимитируются стадией диффузии ионов в активный материал катода или анода. Процесс образования двойного слоя используется для накопления заряда на электродах в суперконденсаторах. В суперконденсаторах используются электродные материалы с высокой удельной поверхностью, 1000 - 3000 м²/г что приводит к увеличению емкости материала за счёт двойного слоя до значений $E = 100 - 300$ Ф/г (при зарядном напряжении 1 В). Эти величины соответствуют значениям удельной энергоемкости 14 - 42 Вт·ч/кг, что существенно ниже, чем у типичных электродных материалов для аккумуляторов (например, $E = 576$ Вт·ч/кг для катодного материала LiFePO₄).

Для дальнейшего повышения удельной емкости суперконденсаторов простого увеличения поверхности недостаточно и необходимо либо увеличивать плотность поверхностных центров, на которых происходит накопление заряда (например, за счет допирования углеродных материалов азотом или серой), либо конвертировать часть накопленного заряда в химическую форму, т.е. в виде продуктов электрохимической реакции. Это процесс является фарадеевским (т.е. выход продукта изменяется пропорционально величине прошедшего заряда) и описывается известными уравнениями кинетики электродных процессов. Однако, анализ экспериментальных данных показывает, что прямое использование этих уравнений на достаточно хорошо описывает эксперимент.

Для увеличения емкости углеродных электродов с одновременным повышением их электрохимической и механической стабильности используют гетерогенное допирование этих материалов добавками нанокристаллических соединений (в первую очередь, оксидов и сульфидов). В данной работе представлены результаты, полученные при введении в углеродную матрицу максена - карбида титана Ti₃C₂T_x с двумерной структурой. Показано, что добавка максена значительно увеличивает вклад псевдоемкости в общую емкость материала, по-видимому, за счёт внедрения ионов в межслоевое пространство максена.

Электроды для суперконденсаторов можно использовать и для емкостной деионизации - обратимого процесса очистки растворителя от ионов за счет электросорбции на электродах. После адсорбции можно провести самопроизвольный процесс десорбции с рекуперацией электроэнергии. Можно использовать различные варианты деионизации (прямой способ, с использованием ионообменных мембран или проточных электродов). Для емкостной деионизации можно использовать как зарядку с образованием двойного слоя, так и эффекты псевдоемкости. В последнем случае наряду с очисткой раствора от ионов можно проводить извлечение тяжёлых металлов, что важно для решения экологических задач. В докладе представлены возможные способы реализации метода емкостной деионизации, проведена оценка эффективности и оптимальные режимы и условия проведения процесса без использования ионообменных мембран.

Работа выполнена в рамках Государственного задания, проект 121032500065-5.

Синтез и электрохимические свойства пористых азотсодержащих углеродных материалов в литий- и натрий-ионных конденсаторах при низких температурах

Ю.В. Федосеева, А.А. Загузина, А.Д. Панфилова,

Е.В. Шляхова, А.В. Окотруб, Л.Г. Булушева

*Институт неорганической химии им. А.В. Николаева СО РАН,**просп. Акад. Лаврентьева 3, Новосибирск, Россия**fedoseeva@niic.nsc.ru***DOI: 10.26902/Graphene-25-053**

Разработка новых эффективных систем накопления и хранения электрической энергии имеет важное значение для развития энергетики и развития технологий и электротранспорта. Благодаря высокой плотности энергии и мощности, длительному сроку службы и низкому саморазряду литий-ионные конденсаторы (ЛИК) являются новыми перспективными электрохимическими устройствами хранения энергии. Пористый углеродный материал, который представляет собой трехмерный углеродный каркас, состоящий из тонких графитовых слоев и иерархической системы пор, обладает высокой сорбционной способностью, хорошей электрической проводимостью, электрохимической стабильностью и низкой стоимостью, поэтому является перспективным электродным материалом ЛИК. В данной работе были получены углеродные и азотсодержащие углеродные материалы методом химического осаждения из газовой фазы (CVD) из этанола или ацетонитрила при температурах 650 и 800 °С. Темплатные наночастицы были получены в CVD-реакторе непосредственно перед синтезом углеродного материала, путем термоллиза тартрата кальция при заданной температуре синтеза в атмосфере этанола или ацетонитрила. Модификацию пористого углеродного материала проводили в атмосфере аммиака при 900 °С. Морфология, состав и строение полученных пористых углеродных материалов были изучены методами растровой электронной микроскопии, рамановской спектроскопии, рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии. Методом низкотемпературной адсорбции азота была определена удельная площадь поверхности образцов, которая составляет 904–1066 м²/г. РФЭС исследования показали концентрация азота на поверхности образцов около 4–5 ат%.

Из полученных пористых углеродных материалов изготавливались рабочие электроды, из которых потом собирались электрохимические ячейки ЛИК. В качестве противоположного электрода использовали металлический литий, а в качестве электролита – 1 М раствор перхлората лития в смеси органических растворителей. Тестирование рабочих катодов проводилось в диапазоне напряжений от 1.8 до 4.0 В отн. Li/Li⁺ в гальваностатическом режиме при плотностях тока 0.05–1 А/г и потенциостатическом режиме при скоростях развертки 0.1–1 мВ/с. Были проведены измерения электрохимического импеданса на разных напряжениях на батарейках. Рабочая температура во время проведения электрохимических измерения варьировалась от +25 до –20 °С.

Материал из ацетонитрила продемонстрировал наиболее высокие емкостные характеристики по сравнению с образцом из этанола, что было связано с присутствием активных азотсодержащих функциональных групп и улучшенными транспортными свойствами. Материал из этанола после высокотемпературной обработки в аммиаке показал наиболее высокую емкость и меньшее падение с ростом плотности тока (56–26 мАч/г в ЛИК при 0.1–1 А/г), а также стабильную работу в течение 2000 циклов. Улучшенные свойства были связаны с присутствием азотсодержащих групп, уменьшением кислородсодержащих групп и структурных дефектов после нагрева в аммиаке. Данный образец так же продемонстрировал наибольшее сохранение емкости с уменьшением рабочей температуры и ростом скорости заряда в ЛИК. При –20 °С, его емкость в ЛИК составляет 53–21 мАч/г при 0.1–1 А/г, что соответствует сохранению 77% и 51% от значений емкости при 25 °С. Квантово-химическое моделирование взаимодействия азотсодержащих графенов с анионом перхлората показало наибольшую энергию связи для гидрированного азота.

Адсорбция лития на пористых углеродных поверхностях

С.А. Созыкин, В.П. Бескачко

*Южно-Уральский государственный университет, пр. Ленина 76, Челябинск, Россия
sozykinsa@susu.ru***DOI: 10.26902/Graphene-25-054**

В последние годы активно развивается перспективный подход построения межатомных потенциалов молекулярной динамики на основе глубоких нейронных сетей. Эти нейросетевые потенциалы обучаются на обширных наборах данных, полученных с помощью квантово-химических расчетов в рамках теории функционала плотности (DFT). Такой подход позволяет существенно расширить возможности моделирования: с одной стороны, он сохраняет высокую точность DFT-расчетов, а с другой – дает возможность исследовать системы, содержащие десятки и сотни тысяч атомов, что выходит далеко за пределы вычислительных возможностей стандартных DFT-методов. Это открывает новые перспективы для изучения материалов со сложной атомной структурой и динамических процессов в наномасштабе.

В настоящей работе сообщается о разработке DeePMD потенциала для моделирования комплексов лития с углеродными наноматериалами, содержащими атомы азота и кислорода. Обучение проводилось на результатах расчета программы VASP для двумерного нитрида углерода (C_2N), тетра-оксо-циркулена (ТОС), бифенилена, ирида-графена, ψ -графена, тетра-пента-дека-гексагональный графена, графена и углеродных нанотрубок. Модели в базе данных можно разделить на два типа: уединенные одно- и двумерные системы и трехмерные. Расчетная ячейка трехмерной системы содержала два слоя C_2N , ТОС или графена. Такие системы нужны для корректного описания разрабатываемым потенциалом межслоевых расстояний. Общее количество моделей в базе данных превышало 12000 штук. При этом в обучающую выборку каждая из моделей попадала с вероятностью 90%. Не попавшие в обучающую выборку модели попадали в валидационную выборку.

Обучение проводилось с использованием дескриптора DPA2, который был внедрен в третью версию программы DeePMD в конце 2024 года. Дескриптор позволяет достигать высокой точности описания атомных взаимодействий за счет учета не только расстояний между парами атомов, но и их взаимного расположения в пространстве, а также особенностей конфигурации троек атомов. Это позволяет более корректно описывать сложные межатомные взаимодействия в моделируемых системах.

Для проверки корректности и надежности разработанного потенциала была проведена серия тестовых расчетов. На первом этапе выполнялось сравнение с известными литературными данными для структур, не содержащих литий. В частности, анализировались такие ключевые характеристики, как фононные спектры, теплопроводность и упругие свойства, которые продемонстрировали хорошее согласие с опубликованными результатами.

Дополнительно проводилось сравнение данных по энергиям адсорбции лития, полученных в рамках различных вычислительных подходов. Результаты расчетов с использованием квантово-химического пакета VASP показали удовлетворительную сходимость с данными, рассчитанными с помощью разработанного потенциала, что подтверждает его применимость для моделирования разнообразных углеродных систем, содержащих литий.

Исследование выполнено при финансовой поддержке гранта Российского научного фонда № 25-22-20023, <https://rscf.ru/project/25-22-20023/>.

Квантовая ёмкость композитной плёнки графен/LVP/LTO с учетом изменения состава в процессе заряда и разряда

В.В. Шунаев, А.А. Петрунин, А.В. Ушаков, О.Е. Глухова

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

shunaevvv@squ.ru

DOI: 10.26902/Graphene-25-055

Актуальной научной проблемой является разработка и усовершенствование энергоаккумулирующих устройств, а также поиск эффективных долговечных электродных материалов, способных сочетать в себе достоинства литий-ионных батарей (высокие удельные электроёмкость и энергоёмкость) и суперконденсаторов (высокая скорость обмена энергией). Композит на основе $\text{Li}_3\text{V}_2(\text{PO}_4)_3$ (LVP), LTO ($\text{Li}_4\text{Ti}_5\text{O}_{12}$) и графена может стать базовым элементом биполярного электрода для литий-ионных батарей, где LVP (катодная часть) и LTO (анодная часть) смешаны в одном слое, а графен обеспечивает электронный транспорт [1]. Такой электрод может попеременно работать как катод или как анод в зависимости от приложенного потенциала. Целью данной работы являлось построение атомистических суперъёмок композита графен/LVP/LTO с различной последовательностью компонентов с помощью метода теории функционала плотности, а также анализ их электронно-энергетических свойств, актуальных при разработке химических источников тока.

В результате квантово-химических расчётов установлено, что наиболее высокий уровень Ферми с большим запасом демонстрирует структура G/LTO/LVP (-4.74 эВ). Можно предположить, что именно композит с данной укладкой обеспечивает оптимальные условия для передачи электрона с композита на токоотвод. Наименьший уровень Ферми обнаружен для последовательности LVP/G/LTO (-5.98 эВ). Для данной структуры уровень Ферми более всего удалён от уровня Ферми графена. Таким образом, данная укладка не позволяет в полной мере использовать проводящие свойства графена, необходимые для создания эффективного токоотвода.

С помощью оригинального алгоритма [2] установлена зависимость квантовой ёмкости и поверхностной плотности заряда исследуемых композитов от прикладываемого напряжения в процессе извлечения и добавления атомов лития. Установлено, что наибольшая квантовая ёмкость наблюдается у композита LVP/G/LTO при разности потенциалов $+1.2$ В (≈ 2480 Ф/г). На основе графика поверхностной плотности заряда установлено, что в случае, когда электролитом литий-ионных батарей является вода и ионная жидкость, композит G/LTO/LVP может работать только как анод, G/LVP/LTO – как катод, и только LVP/G/LTO – как асимметричный электрод.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант № 25-22-00290).

[1] Wang L., Li X., Tang Z., Zhang X. // *Electrochem. Comm.* 2012. V. 22. P.73.

[2] Шунаев В.В., Петрунин А.А., Ушаков А.В., Глухова О.Е. // *ЖТФ.* 2024. Т. 94. № 3. С. 372.

Моделирование образования и трансформации углеродных наноструктур при облучении электронами в ПЭМ

А.М. Попов¹, И.В. Лебедева^{2,3}, А.С. Сеница⁴, Ю.Г. Польшинская⁴, А.А. Книжник⁴

¹Институт спектроскопии РАН,

ул. Физическая 5, Троицк, Москва, Россия

²CIC nanoGUNE BRTA, San Sebastián 20018, Spain

³Simune Atomistics, Avenida de Tolosa 76, San Sebastián 20018, Spain

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

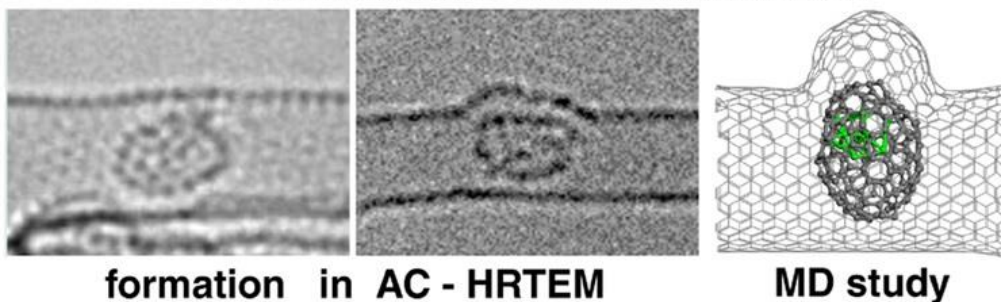
popov-isaa@mail.ru

DOI: 10.26902/Graphene-25-056

Развитие методов просвечивающей электронной микроскопии (ПЭМ) высокого разрешения привело к возможности не только получать изображение наноструктур с атомным разрешением, но и непосредственно наблюдать химические реакции и перестройку связей, индуцированные облучением электронами. Более того, возникла возможность осуществлять контроль *in situ* за процессами индуцированной облучением трансформации и образования наноструктур и даже управлять такими процессами.

В докладе будут рассмотрено моделирование методом молекулярной динамики с использованием алгоритма CompuTEM [1] образования и трансформации углеродных наноструктур при облучении электронами в просвечивающем электронном микроскопе. Будут представлены результаты моделирования следующих процессов: 1) разрезание нанотрубок и графена кластером металла (например, на игле зонда) при одновременном облучении электронами, 2) образование новых типов металлофуллеренов и гетерофуллеренов, 3) образование новых молекул и полимеров, содержащих атомарные цепочки углерода из полициклических углеводородов после удаления атомов водорода ударами электронов. Примеры сравнения структур, полученных при моделировании и в эксперименте, показаны на Рис. 1.

Ni endohedral metallofullerenes



Carbon nanotubes cutting

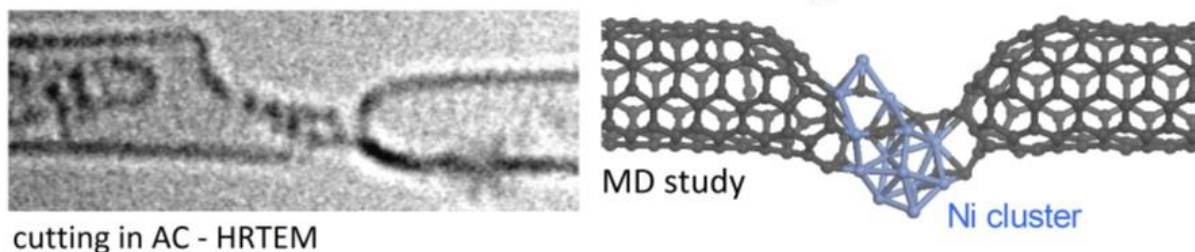


Рис. 1. Сравнение структур, полученных в эксперименте и при моделировании: образование металлофуллерена с кластером никеля внутри (сверху) и разрезание углеродной нанотрубки (внизу).

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

[1] Skowron S.T., Lebedeva I.V., Popov A.M., et al Nanoscale. 2013. V. 5. N. 15. P. 6677.

Germanene-based two-dimensional magnet with tunable properties

S.V. Ereemeev¹, A.V. Matetskiy^{2,3}, A. Barla², P. Moras², C. Carbone², V. Milotti^{2,4},
C.A. Brondin², Z.R. Benher², M. Holub⁵, P. Ohresser⁵, E. Otero⁵, F. Choueikani⁵, I. A. Shvets⁶,
A.N. Mihalyuk^{7,8}, P. M. Sheverdyeva²

¹*Institute of Strength Physics and Materials Science SB RAS, Tomsk, Russia*

²*CNR-Istituto di Struttura della Materia (CNR-ISM), Trieste, Italy*

³*Peter Grünberg Institute (PGI-3), Forschungszentrum Jülich, Germany*

⁴*Università degli Studi di Padova, Padova, Italy*

⁵*Synchrotron-SOLEIL, Saint-Aubin, France*

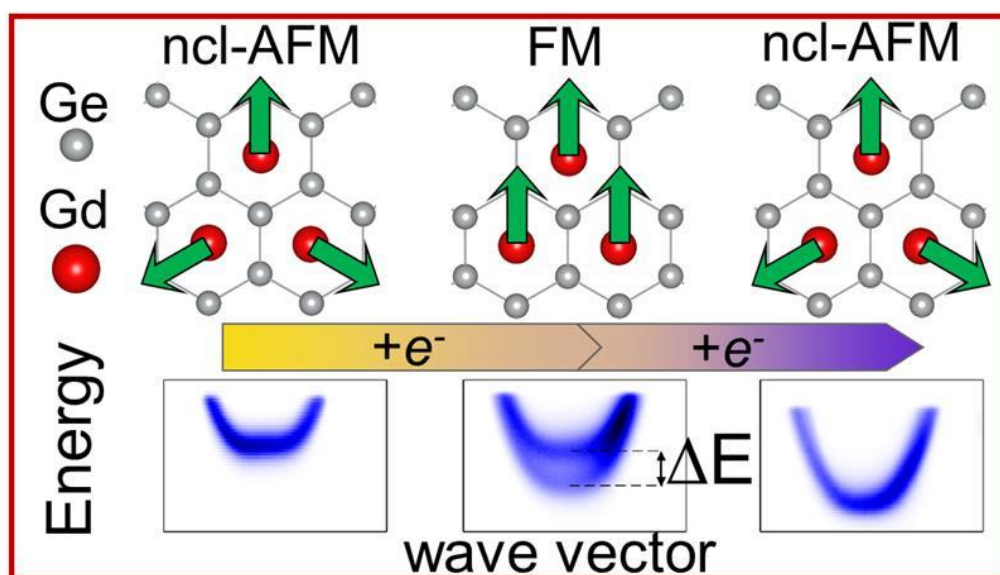
⁶*Tomsk State University, Tomsk, Russia*

⁷*Far Eastern Federal University, Vladivostok, Russia*

⁸*Institute of Automation and Control Processes FEB RAS, Vladivostok, Russia*
eremeev@ispms.tsc.ru

DOI: 10.26902/Graphene-25-057

Magnetic order engineering in two-dimensional Dirac systems is of great interest for theoretical and technological exploration. Up to now, the experimental advances in this field mostly concerned graphene monolayers. Here we report a comprehensive study [1] of a monolayer-thick germanene-like sheet in contact with gadolinium atoms. Direct observations supported by first-principle calculations reveal the fingerprints of the Dirac fermions in the electronic structure and a non-collinear antiferromagnetism. The hybridization of the germanene layer with Gd atoms leads to a large and tunable gap in the Dirac states that carry a nonzero spin-Berry curvature. We discovered that a cesium-induced controlled electron doping can switch the system into a ferromagnetic state and then back to the non-collinear antiferromagnet at saturated cesium monolayer limit. We explain these reversible magnetic transitions by the oscillatory behavior of the Ruderman-Kittel-Kasuya-Yosida interaction and suggest that this system could find application in magnetoelectronics and spintronics.



[1] Matetskiy A.V. *et al.* // ACS Nano 2025 (accepted) <https://doi.org/10.1021/acsnano.5c03331>.

Синтез металл-углеродных композитных материалов плазмохимическими методами

Д.В. Смовж, О.А. Нерушев, М.С. Скирда

¹*Институт теплофизики им. С.С. Кутателадзе СО РАН, просп. Акад. Лаврентьева 1,
Новосибирск, Россия
smovzh@itp.nsc.ru*

DOI: 10.26902/Graphene-25-058

Графитовая дуга активно применяется для синтеза различных углеродных наноструктур (фуллерен, нанотрубки, графен) и металл-углеродных композитов. Варьируя параметры электродугового разряда при синтезе композитных материалов, возможно, управлять структурой углеродной матрицы, фазовым состоянием наночастиц и структурой интерфейса наночастица-углерод. Электродуговые композитные материалы могут эффективно применяться в качестве каталитических систем, материалов для электродов химических источников тока и конструкционных наноматериалов. Дуговой метод относится к классу «простых» - одностадийных, масштабируемых технологий. Продуктами электродугового распыления могут являться все аллотропные модификации углерода, наночастицы металлов и их оксидов и любые комбинации перечисленных выше веществ. Свойства наночастиц и нанокомпозитов зависят не только от параметров синтеза, но и от последующей обработки либо выдержки в различных атмосферах. Графитовая дуга позволяет получать наночастицы, инкапсулированные в аморфную углеродную матрицу, либо наночастицы покрытые графеновыми слоями, что обеспечивает стабильность свойств материалов при длительном хранении.

В работе электродуговой синтез наночастиц железа, кремния, кобальта, титана, меди, марганца и алюминия проводился при токе разряда 100 А, в атмосфере гелия и давлении 25 мбар. В качестве катода использовалась графитовая таблетка 20 мм, в качестве анода графитовый стержень 8 мм, с центральным отверстием 4.2 мм в которое забивалась смесь порошков углерод-металл с соотношением 3:1, что соответствует полному содержанию металла в стержне 10-20% масс. Термическая обработка материалов проводилась в атмосферах водорода и воздуха в диапазоне температур от 100 до 1000 °С с шагом 100 градусов. На каждом шаге материал выдерживался при заданной температуре в течение 1 часа. Полученные материалы исследовались методом ТГА, РФА, КР, ПЭМ, СЭМ.

Показано что, варьируя параметры электродугового синтеза и последующей обработки можно контролировать средний размер наночастиц и их фазовый состав. Изменение вольт-амперных характеристик определяет фазовый состав и средний размер наночастиц, данный параметр может рассматриваться как параметр, определяющий массовый выход материала при синтезе. Атмосфера разряда существенно влияет на структуру графитовой матрицы, изменяя степень ее графитизации, что в свою очередь приводит к изменению транспортных параметров в среде к наночастицам активной компоненты. При изменении атмосферы изменяется также степень кристалличности наночастиц металлической добавки. Главным параметром позволяющим варьировать размер наночастиц является давление разряда, однако, диапазон изменения размеров для каждого материала индивидуален и ограничен. При больших давлениях происходит изменение функции распределения наночастиц по размерам на бимодальную, что делает подход плохо применимым к синтезу наночастиц размером более 50 нм. Более крупные частицы могут быть получены путем отжига композитов, при этом использование воздушной атмосферы при отжиге приводит к формированию оксидных наночастиц, водородной – металлических. Магнитные свойства материалов так же изменяются при термической обработке в различных атмосферах, за счет фазовых превращений при отжиге.

*Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ (грант № 24-19-00357)
<https://rscf.ru/project/24-19-00357/>*

Компьютерное моделирование электронного строения системы графен-медь

И.А. Федоров

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

ifedorov@kemsu.ru

DOI: 10.26902/Graphene-25-059

Недавно впервые был синтезирован одноатомный металлический слой [1]. Ван-дер-ваальсовы гетероструктуры, состоящие из различных двумерных слоев, представляют интерес для практического применения, так как имеют уникальные физико-химические характеристики [2]. Таким образом, представляет интерес исследовать структурные и электронные свойства системы графен-медь.

Для исследования структурных и электронных свойств системы графен-медь использовались пакеты Quantum ESPRESSO и CRYSTAL17. Современные реализации скорректированного функционала плотности позволяют корректно учитывать ван-дер-ваальсово взаимодействие между компонентами системы. В данной работе для учета ван-дер-ваальсового взаимодействия использовалась схема DFT-D3(BJ).

Размер элементарной ячейки одноатомного слоя меди равен 2.44 Å, что хорошо согласуется с имеющимися литературными данными. Корректный учет ван-дер-ваальсовых сил позволил определить равновесную конфигурацию исследуемой системы. Равновесное расстояние и соответствующее значение энергии связи равны 3.1 Å и -156.8 мэВ, соответственно.

Графен имеет заполненные электронные оболочки, поэтому взаимодействие между слоями графена соответствует взаимодействию по типу закрытых оболочек. Одноатомный слой меди имеет неспаренные электроны, поэтому представляет интерес изучить распределение электронной плотности. Для анализа распределения электронной плотности использовался топологический анализ на основе теории Бейдера. Также было выполнено исследование разности электронных плотностей между компонентами системы графен-медь и вычислены заселенности атомных орбиталей атомов углерода и меди. Это позволило определить перераспределения электронов между компонентами исследуемой системы, чтобы выявить механизмы формирования химической связи.

Работа поддержана Министерством науки и высшего образования Российской Федерации (проект № FZSR-2024-0005).

[1] Kashiwaya S. *et al.* // Nat. Synth., 2024. V. 3. P. 744.

[2] Novoselov K. *et al.* // Science. 2016. V. 353. N. 6298. P. 1.

Влияние дефектов Стоуна–Уэльса и деформации кручения на кислородную функционализацию МУНТ

Н.Г. Бобенко¹, В.В. Шунаев², В.Е. Егорушкин¹, О.Е. Глухова^{2,3}

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

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

*³Первый Московский государственный медицинский университет им. И.М. Сеченова,
ул. Трубецкая 8 стр. 2, Москва, Россия*

nbobenko@ispms.ru

DOI: 10.26902/Graphene-25-060

Современные исследования показывают, что высокая реакционная способность многостенных углеродных нанотрубок (МУНТ) в процессе кислородной функционализации проявляется преимущественно в присутствии примесей, вакансий, дефектов Стоуна–Уэльса и механических деформаций. Экспериментальные данные, полученные методами СЭМ, КР-спектроскопии, РФС и NEXAFS, подтверждают наличие таких структурных дефектов в МУНТ в результате постобработки и взаимодействия с внешней средой [1]. Механизмы влияния дефектов и деформаций на кислородную функционализацию МУНТ недостаточно изучены. В данной работе исследуется влияние примеси азота, дефектов Стоуна–Уэльса и торсионной деформации. Используя метод SCC DFTB, проведён расчет электронной структуры, перераспределения заряда и энергетических барьеров присоединения карбоксильных групп для недеформированных и деформированных участков поверхности нанотрубок. Установлено, что в деформированных структурах заряд локализуется в области дефектов Стоуна–Уэльса, плотность состояний на уровне Ферми возрастает, а уровень Ферми понижается. Суммарный энергетический барьер (0,101 эВ/атом) функционализации деформированных МУНТ карбоксильными группами почти в 1.4 раза меньше в сравнении с барьером (0,144 эВ/атом) исходных [2]. Присоединение гидроксильной группы к карбонильной при образовании карбоксила в скрученных областях протекает безбарьерно, облегчая ее образование [2]. Результаты подчеркивают важность торсионных деформаций как фактора, усиливающего химическую активность МУНТ. Деформационное снижение барьера, перераспределение заряда и рост локальной реакционной способности делают такие структуры перспективными для применения в электрохимии, катализе и биомедицине.

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

[1] Bobenko N.G. *et al.* // Synthetic Metals. 2024. V. 307. P. 117677.

[2] Бобенко Н.Г. и др. // ХФМ. 2025. Т. 27. № 2. С. 134.

**Молекулярно-динамическое моделирование переноса
графена на различные подложки**

В.А. Андриющенко, К.В. Артишевский

*Институт теплофизики им. С.С. Кутателадзе СО РАН,
просп. Акад. Лаврентьева 1, Новосибирск, Россия
vladimir.andryushchenko@gmail.com*

DOI: 10.26902/Graphene-25-061

Графен, благодаря своей уникальной электронной структуре, механической прочности и гибкости, является перспективным материалом для многих практических приложений. Однако, его практическое применение требует эффективных методов переноса на различные поверхности. Одним из наиболее распространённых методов переноса графена является перенос через воду – процесс, в котором графен, выращенный с помощью метода химического осаждения из газовой фазы на металлической подложке (например, меди или никеле), переносится на целевую подложку с использованием водной среды. Однако, как было показано экспериментально [1], этот процесс существенно зависит от лиофильных свойств поверхности, так как капиллярные силы могут вызывать значительные деформации графена. Данное обстоятельство в значительной степени влияет на свойства получаемой системы графен-подложка и, соответственно, определяет область применения графена. Также варьируются толщина начального водного слоя и температура системы. Для моделирования воды используется модель TIP43P, в свою очередь, для моделирования графена используется реакционный потенциал AIREBO [2]. Моделирование производится с помощью пакета LAMMPS. В процессе моделирования определяется динамика водного слоя изначально находящегося между графеном и подложкой.

В результате моделирования установлено, что усиление лиофильных свойств подложки приводит к улучшению прилегания графена к поверхности, а также увеличению деформаций графена при его переносе через воду. При этом происходит как испарение воды, так и вытеснение ее из области между графеном и подложкой из-за действия капиллярных сил. В свою очередь, для менее гидрофильных систем такого вытеснения не происходит, и единственным механизмом удаления воды из области между графеном и подложкой является испарение воды. При этом графен в меньшей степени прилегает к подложке и испытывает меньшие деформации.

Результаты данного исследования могут быть использованы для улучшения технологий переноса графена, что может быть полезно для развития технологий на основе 2D-материалов.

[1] Andryushchenko V.A. *et al.* // JML. 2024. V. 395. P. 123827.

[2] Brenner D.W. *et al.* // JPCM. 2002. V. 14. N. 4. P. 783.

Одностадийный метод модификации и восстановления оксида графена

Ю.В. Бондарева¹, Д.Г. Квашнин², С.А. Евлашин¹

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

²Институт биохимической физики им. Н. М. Эмануэля РАН,

ул. Косыгина 4, Москва, Россия

j.bondareva@skoltech.ru

DOI: 10.26902/Graphene-25-062

Процесс восстановления оксида графена (ОГ) с использованием физических и химических методов детально изучен в научной литературе. Однако особый интерес представляет разработка новых комбинированных подходов, совмещающих восстановление с направленной модификацией ОГ для целенаправленного изменения его физико-химических свойств. В нашей работе мы исследовали взаимодействие ОГ, синтезированного по модифицированному методу Хаммерса, с азотистыми основаниями - молекулами индола и имидазола [1–3]. Эти соединения были выбраны в качестве потенциальных агентов для восстановления кислородсодержащих функциональных групп на поверхности ОГ и образования различных типов связей с кислородсодержащими группами ОГ (-COOH, -OH, эпоксидные группы). Комплексное исследование водных суспензий ОГ с указанными соединениями методами спектроскопии комбинационного рассеяния и УФ-видимой спектроскопии позволило установить частичное восстановление ОГ при взаимодействии с азотистыми основаниями, а также выраженную зависимость механизма взаимодействия от кислотности среды. Так, например, в кислых условиях (рН <4) преобладают процессы восстановления, тогда как в щелочной среде (рН >8) преобладают процессы комплексообразования через π - π взаимодействия. Результаты титрования с NaOH подтвердили влияние рН на содержание кислородных групп на поверхности ОГ. Теоретические расчёты выявили энергетически выгодные конфигурации комплексов ОГ с органическими молекулами и подтвердили, что индол и имидазол образуют комплексы на поверхности ОГ, взаимодействуя с гидроксильными (-OH) группами (с образованием молекул воды) или с эпоксидными группами, что способствует частичному восстановлению ОГ. Понимание механизмов взаимодействия ОГ с азотсодержащими органическими молекулами, а также факторов, влияющих на эти процессы, является ключевым этапом в направленной функционализации ОГ и разработке многофункциональных устройств на основе графеноподобных структур.

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

[1] Huang Y., Liu P., Wang L. // NANO. 2013. V. 8. № 2. P. 1350017.

[2] Roy D. *et al.* // Carbon. 2020. V. 166. P. 361.

[3] Snitkoff R.Z. *et al.* // Carbon. 2019. V. 143. P. 223.

Условия необходимые для возникновения высокотемпературной сверхпроводимости в углеродном материале.

А.Н. Ионов¹, А.Н.Бугров^{2,3}

¹*Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе РАН, Санкт-Петербург, Россия*

²*Институт высокомолекулярных соединений РАН, Санкт-Петербург, Россия*

³*Санкт-Петербургский государственный электротехнический университет "ЛЭТИ",*

Санкт-Петербург, Россия

ionov@tuch.ioffe.ru

DOI: 10.26902/Graphene-25-063

Первая работа, где наблюдались джозефсоновские вольт-амперные характеристики в углероде при комнатной температуре и нормальном внешнем давлении, указывающие на эффект сверхпроводимости, была опубликована К. Antonowicz еще в 1974 году [1]. В дальнейшем, эффект комнатой сверхпроводимости наблюдали во многих лабораториях мира в высокоориентированном, поликристаллическом графите [2-4]. Однако проблема была в том, что в одном углеродном образце эффект наблюдался и был воспроизводимым, а в другом с виду аналогичном образце эффект сверхпроводимости отсутствовал. Существенный сдвиг в понимании возникновения комнатной сверхпроводимости произошел при исследовании гибридных частиц на основе полистирола и многослойного графена [5,6]. На основании исследований намагниченности, которая демонстрировала сверхпроводимость второго рода [7,8], вольт-амперных характеристик джозефсоновского типа, а также результатов настоящей работы, в которой были исследованы частицы графена, а также графена, высаженного на различные подложки был сделан вывод, что эффект комнатной сверхпроводимости в графене, а также в углеродных материалах может быть обусловлен следующими условиями: 1) флуктуирующим деформационным полем в листах графена, которое приводит к радикальной модификации его плотности состояний на уровне Ферми; 2) последующим допированием носителями тока при их контакте с ароматическими растворителями. Эти выводы находятся в согласии с современными теоретическими моделями [4,9].

[1] Antonowicz K. // Nature. 1974. V. 247. P. 358.

[2] Esquinazi P. *et al.* // Phys. Rev. B. 2008. V. 78. P. 134516.

[3] Kawashima Y. // AIP Adv. 2013. V. 3. P. 052132.

[4] Kopelevich Y. *et al.* // Adv. Quantum Technol. 2024. V. 7. P. 2300230.

[5] Ionov A.N. // J. Low Temp. Phys. 2016. V. 185. P. 515.

[6] Ионов А.Н. и др. // Письма в ЖТФ. 2024. Т. 50. № 13.

[7] Ionov A.N. *et al.* // Materials. 2021. V. 14. P. 2519.

[8] Ionov A.N. *et al.* // Nanomaterials. 2021. V. 11. P. 40.

[9] Uchoa B., Barlas Y. // Phys. Rev. Lett. 2013. V. 111. P. 046604.

Экспериментальное и теоретическое исследование транспортных свойств углеродных наноструктур: механизмы отрицательного дифференциального сопротивления

Д.А. Чернодубов¹, А.В. Инюшкин¹, М.А. Тархов², А.А. Пилевский³,
В. Перебейнос⁴, С.А. Евлашин⁵

¹Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт», Москва, Россия

²Институт нанотехнологий микроэлектроники РАН, 119991 Москва, Россия

³Научно-исследовательский институт ядерной физики им. Д. В. Скобельцына, 119991 Москва, Россия

⁴Department of Electrical Engineering, University at Buffalo, The State University of New York, 14260 Buffalo, New York, USA

⁵Сколковский институт науки и технологии, Большой бульвар 30 стр.1, Москва, Россия
chernodubov_DA@nrcki.ru

DOI: 10.26902/Graphene-25-064

В современной нанoeлектронике углеродные наноструктуры, такие как графен, углеродные нанотрубки и наностенки, привлекают особое внимание благодаря своим уникальным транспортным свойствам. В частности, в них проявляется эффект отрицательного дифференциального сопротивления, заключающийся в уменьшении величины тока при увеличении напряжения, который может быть использован для создания умножителей частоты, элементов памяти и высокочастотных генераторов вплоть до терагерцового диапазона [1]. Этот эффект наблюдался в случае различных углеродных наноструктур, включая моно- и многослойные тонкие пленки графена, оксид графена и углеродные нанотрубки [2]. Существующие теоретические модели объясняют отрицательное дифференциальное сопротивление через изменение зонной структуры материалов, поверхностные окислительно-восстановительные процессы или джоулев нагрев, причем последний механизм при определенных температурах может проявляться независимо от конкретного механизма транспорта заряда [3].

В работе исследовано возникновение отрицательного дифференциального сопротивления S-типа в углеродных наностенках (УНС). Для проведения эксперимента на кремниевых подложках были выращены УНС различной толщины методом химического осаждения из газовой фазы в разряде постоянного тока (DC PECVD). Структуры и их дефектность были охарактеризованы методами сканирующей электронной микроскопии и комбинационного рассеяния света. Транспортные свойства наноструктур были измерены в диапазоне температур 5–300 К. Для измерения теплопроводности использовались методы 3-омега и стационарного теплового потока. Для электрических измерений методом лазерной абляции были изготовлены меандровые структуры на основе УНС.

Обнаружено, что пленки УНС толщиной 400 нм обладают отрицательным дифференциальным сопротивлением при температурах ниже 37 К, в то время как для пленок толщиной 1 мкм этот эффект не наблюдается. Температурная зависимость электропроводности при температурах ниже 100 К для всех образцов хорошо описывается в рамках модели Френкеля-Пула. Результаты свидетельствуют, что наблюдаемый эффект отрицательного дифференциального обусловлен преимущественно джоулевым нагревом. Численное моделирование показывает, что устройства на основе УНС могут обеспечить быстроедействие на уровне ГГц, что открывает перспективы их применения в высокочастотной электронике.

Работа выполнена при финансовой поддержке госзадания НИЦ «Курчатовский институт».

[1] Wu Y. et al. // ACS Nano. 2012. V.6. N. 3. P. 2610.

[2] Evlashin S.A. et al. // Phys. Rev. Appl. 2022. V. 15. N. 5. P. 054057.

[3] Gibson G.A. // Adv. Funct. Mater. 2015. V. 28. N. 22. P. 1704175.

Моделирование магнитного пробоя в треугольных решетках антиточекВ.А. Ткаченко^{1,2}, О.А. Ткаченко², Д.Г. Бакшеев²¹Институт физики полупроводников им. А.ВГ Ржанова СО РАН,
просп. Акад. Лаврентьева 13, Новосибирск, Россия²Новосибирский государственный университет, ул. Пирогова 1, Новосибирск, Россия
vtkach@isp.nsc.ru**DOI: 10.26902/Graphene-25-065**

Осцилляции магнитного пробоя (ОМП) в термодинамических и транспортных свойствах металлов и латеральных сверхрешеток обеспечивают сверхчувствительную диагностику поверхности Ферми. Так, минизонная структура “муаровых” сверхрешеток в графене недавно реконструирована по измерениям квантовых осцилляций сопротивления и намагниченности [1]. Современные полупроводниковые технологии позволяют создавать ультра-чистые латеральные сверхрешетки с периодом $L \sim 0,1$ мкм в затворно-управляемом двумерном электронном газе гетероструктур GaAs/AlGaAs. Недавно в осцилляциях сопротивления треугольной решетки антиточек в GaAs/AlGaAs были обнаружены ранее не наблюдавшиеся полущелые комбинации фундаментальных частот ОМП, а также две пары частот “соизмеримости”, определяемых из условия кратности ширины циклотронных орбит электрона расстоянию между рядами антиточек [2]. Мы промоделировали этот эксперимент в рамках модели многотерминального одночастичного квантового рассеяния и формализма Ландауэра-Бьютикера. Подобно эксперименту [2], решетка в расчетах заполняет квадратную область размером несколько мкм. Четыре канала субмикронной ширины подходят к углам квадратной области и соединяют ее с электронными резервуарами. Остаточный беспорядок имитируется случайной добавкой к потенциалу в каждом узле расчетной квадратной сетки. Задается амплитуда U периодического потенциала, энергия Ферми E_F и перпендикулярное к плоскости решетки магнитное поле B . Для нулевой температуры вычисляются зависимости плотности состояний в решетке $\text{DoS}(1/B)$ и 4-терминальных сопротивлений $R_{xx}(1/B)$, $R_{yy}(1/B)$. Преобразование Фурье этих зависимостей дает частоты осцилляций в широком интервале E_F . В фурье-спектре $\text{DoS}(1/B)$ найдены только онзагеровские частоты. Их значения близки к частотам $f(A_i)$, ожидаемым из условия квантования площадей $A_i(E_F)$ циклотронных орбит в импульсном представлении. В фурье-спектре сопротивлений, кроме онзагеровских частот, обнаружены частоты неонзагеровских осцилляций. К неонзагеровским осцилляциям (их ассоциируют с “запрещенными” орбитами, которые состоят из дуг с противоположным направлением вращения электрона) относятся осцилляции “соизмеримости” и “зонная” осцилляция, частота которой определяется площадью зоны Бриллюэна и не зависит от E_F . В фурье-спектрах сопротивления треугольной решетки есть не только $f(A_{BZ})$, но и $f(A_{BZ})/2$, и кратные им частоты. Хотя зонная частота $f(A_{BZ})$ не наблюдалась до сих пор в латеральных полупроводниковых решетках, частоты $f(A_{BZ})$ и $f(A_{BZ})/2$ присутствуют в разностях наблюдаемых частот соизмеримости. Расчеты ОМП в треугольной решетке хорошо воспроизводят результаты эксперимента [2]. Аналогичные расчеты 4-терминального квантового рассеяния в решетках с одномерной модуляцией [3] показывают, что при повышенной амплитуде U периодического потенциала в фурье-спектре зависимости $R_{xx}(1/B)$ возникает пик с частотой равной половине частоты осцилляций соизмеримости, поэтому полущелые частоты могут появляться и в решетках с двумерной модуляцией.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ (грант № 19-72-30023).[1] Bocarsly M. *et al.*// Science. 2024. V. 383. N. 6678. P. 42.[2] Wang D.Q. *et al.*// Nano Letters. 2023. V. 23. N. 5. P. 1705.[3] Tkachenko O.A. *et al.*// JETP Letters. 2025. V. 121. N. 6. P. 496.

Электрические свойства структур на основе двухмерного дисульфида молибдена

П.В. Винокуров, С.А. Смагулова

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

ул. Белинского 58, Якутск, Россия

pv.vinokurov@s-vfu.ru

DOI: 10.26902/Graphene-25-066

Гетероструктуры на основе двухмерных материалов в настоящее время являются основным направлением создания приборных структур в нанoeлектронике. Вертикальные ван-дер-Вальсовые гетероструктуры, созданные путем последовательного переноса слоев двухмерных материалов друг на друга, когда слои в единой структуре удерживаются только за счет сил ван-дер-Вальса, обладают новыми электронными свойствами, которые расширяют их возможности для фундаментальных исследований и практического применения.

В данной работе исследованы электрические характеристики пленок дисульфида молибдена, синтезированных методом CVD из порошковых прекурсоров MoO_3 и S. Для снятия вольт-амперных характеристик пленок MoS_2 , лежащих на подложках SiO_2/Si , были использованы серебряные контакты. Обнаружена зависимость свойств контакта Ag/MoS_2 от количества слоев пленок MoS_2 . Для многослойных пленок дисульфида молибдена формируется омический контакт между серебром и MoS_2 , в то время как для малослойных образуется барьер Шоттки. Из температурных зависимостей вольт-амперных характеристик рассчитаны энергии активации проводимости, равные 0,26 эВ и 0,22 эВ для двухслойных и трехслойных пленок MoS_2 соответственно. Для однослойных пленок MoS_2 вольт-амперные характеристики показали наличие эффекта резистивного переключения. С использованием метода зарядовой спектроскопии глубоких уровней (Q-DLTS) в пленках MoS_2 найден уровень 0,20 эВ ниже зоны проводимости.

Созданы и исследованы ван-дер-Ваальсовые вертикальные гетероструктуры графен/ MoS_2 , в которых графен является прозрачным проводящим материалом, тогда как MoS_2 , относящийся к семейству дихалькогенидов переходных металлов, обладает полупроводниковыми свойствами. На основе вертикальной ван-дер-Ваальсовой гетероструктуры графен/ MoS_2/Si создан солнечный элемент, который способен генерировать напряжение 0,48 В при освещении галогеновой лампой.

Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ (грант № 23-79-00065).

Квантово-химическое исследование влияния допирования дисульфида молибдена (MoS₂) атомами азота на электрохимические свойства

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

*Институт неорганической химии им. А.В. Николаева СО РАН,
просп. ак. Лаврентьева 3, Новосибирск, Россия*

alekseev@niic.nsc.ru

DOI: 10.26902/Graphene-25-067

Дисульфид молибдена (MoS₂) – перспективный материал для создания электродов литий ионных аккумуляторов (ЛИА) благодаря своей доступности, слоистой структуре и высокой теоретической емкости [1]. Однако, низкие электропроводность и степень обратимости реакции конверсии ограничивают применение MoS₂ в ЛИА. Легирование MoS₂ может послужить путем улучшения целевых параметров за счет увеличения электронной проводимости, включения дополнительных центров накопления ионов лития. Так, азот является привлекательным примесным элементом благодаря его доступности и облегченному введению в структуру MoS₂ по существующим синтетическим методикам. В работах [2,3] продемонстрировано улучшение стабильности работы и емкостных характеристик при легировании атомами азота.

Сложносоставная архитектура модифицированного азотом MoS₂ (N-MoS₂) затрудняет экспериментальное установление факторов, влияющих на целевые параметры материала. В связи с этим, было проведено моделирование электрохимического литирования N-MoS₂ с использованием квантово-химических расчетов и первопринципного молекулярного моделированием с помощью пакета программ Quantum ESPRESSO.

В ходе исследования были найдены энергетически выгодные распределения дефектов азота в структуре N-MoS₂. Показано, что встраивание азота в базальную плоскость не способствует избыточному накоплению электроактивных ионов Li по сравнению с чистым MoS₂. В ходе проведения молекулярно-динамических симуляций обнаружено, что увеличении концентрации азота в N-MoS₂ приводит к более раннему протеканию реакции конверсии.

Работа поддержана Российским научным фондом, проект № 23-73-00048.

[1] Stephenson T. *et al.* // Energy Environ. Sci. 2013. V. 7. № 1. P. 209.

[2] Qin S. *et al.* // J. Mater. Chem. A. 2016. V. 4. № 4. P. 1440.

[3] Kotsun A.A. *et al.* // J. Alloys Compd. 2023. V. 947. P. 169689.

Одностадийная процедура введения азота в углеродные материалы обработкой в NO

А.А. Ананьина, С.В. Семиколенов, А.М. Дмитрачков, А.В. Нартова

Институт катализа им. Г. К. Борескова, СО РАН,

просп. Акад. Лаврентьева 5, Новосибирск, Россия

a.ananina@catalysis.ru

DOI: 10.26902/Graphene-25-068

В области гетерогенного катализа все чаще поднимается вопрос контролируемого влияния носителя катализатора на частицы активного компонента и, соответственно, каталитические свойства системы в целом. Во многих каталитических процессах в качестве носителей частиц металлов широко используются углеродные материалы (УМ), введение азота в состав которых приводит к изменению свойств катализаторов: увеличивает термическую стабильность по отношению к спеканию, изменяет поверхностные свойства, и, как результат, влияет на каталитическую активность и селективность систем [1].

В рамках данного исследования впервые для модифицирования углеродных носителей (Сибуниты, углеродные нанотрубки (УНТ), высокоориентированный пиролитический графит (ВОПГ)) использована низкотемпературная (50 – 230°C) газовая пост-обработка в присутствии NO в статическом Parr-реакторе. Отработана процедура варьирования содержания азота в разных углеродных носителях изменением условий обработки (давления газовой фазы, температуры и продолжительности обработки). В случае Сибунита диапазон содержания азота составляет 0.6 – 11 ат.%. При помощи метода сканирующей туннельной микроскопии (СТМ) для образца ВОПГ, модифицированного в присутствии NO, показано наличие «расходящихся» ступенек, образующихся в ходе травления (Рис.1). На основе сопоставления данных рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии и метода БЭТ для N-Сибунитов выявлены корреляции между химическим составом поверхности и условиями модифицирования, выдвинута гипотеза о механизме модифицирования выгоранием углеродных слоев в NO через превращение кислородсодержащих функциональных групп в NO_x- группы и далее в пиридиновый, пиррольный и графитовый азот [2]. Показано, что используемый подход позволяет также варьировать текстурные характеристики носителя (площадь удельной поверхности, объем пор) в ходе обработки в реакторе, что дает возможность синтезировать материалы с разнообразными свойствами для различных применений, в частности, в качестве носителей в катализаторах.

Предложенная процедура модификации обработкой в NO универсальна и позволяет вводить азот в состав различных УМ в одну стадию.

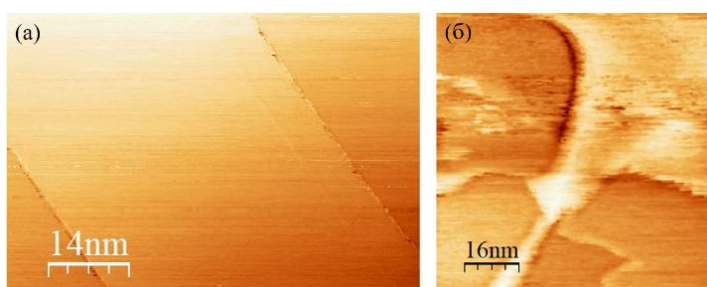


Рис.1. СТМ-изображения (а) исходный ВОПГ; (б) образец после обработки NO ($p = 1$ атм NO, $t = 230^\circ\text{C}$, 24 ч) в Parr-реакторе.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (грант № 24-63-00037, <https://rscf.ru/project/24-63-00037/>).

[1] Philippe Serp, Bruno Machado // RSC Catalysis Series. 2016. Т. 23. С. 1-45.

[2] Нартова А.В. и др. // Кинетика и Катализ. 2023. Т. 64. № 4. С. 1-8.

Композитный газовый сенсор на основе CVD-графенаА.И. Богомолова^{1,2}, Д.В. Смовж¹, А.Г. Баннов³¹Институт теплофизики им. С.С. Кутателадзе СО РАН,
просп. Акад. Лаврентьева 1, Новосибирск, Россия²Новосибирский государственный университет, ул. Пирогова 1, Новосибирск, Россия³Новосибирский государственный технический университет,
просп. К. Маркса 20, Новосибирск, Россияa.bogomolova1@q.nsu.ru**DOI: 10.26902/Graphene-25-069**

Графеновые газовые датчики обладают высокой чувствительностью, селективностью и быстрым временем реагирования на изменение концентрации газов в окружающей среде. Такие датчики имеют широкий спектр потенциальных применений в различных областях, включая медицину, промышленность, экологию и безопасность, например, для обнаружения токсичных и загрязняющих веществ [1].

В данной работе апробирован метод создания композитных сенсоров на основе CVD-графена с электродуговой сажей с различными добавками и наночастицами оксида олова, нанесенными магнетронным распылением. Проведено сравнительное исследование сенсоров NO₂ на основе графенового токопроводящего слоя, модифицированного наночастицами олова и электродуговой сажей с добавками Mn, Sn, Al. Показано, что функционализация существенно влияет на сенсорный отклик датчика. Наилучшую чувствительность показал датчик CVD-графена с электродуговой сажей с добавлением олова. Отклик данного композитного сенсора составил 39%, в то время как отклик немодифицированного CVD-графена составил 4% (Рис. 1).

Перспективы описанного подхода связаны, в том числе, с универсальностью электродугового метода для получения композитов с широким спектром добавок и возможностью управления степенью графитизации углеродной матрицы и размером наночастиц добавки, что может позволить создавать селективные высокочувствительные системы типа «умный нос» на одном графеновом чипе.

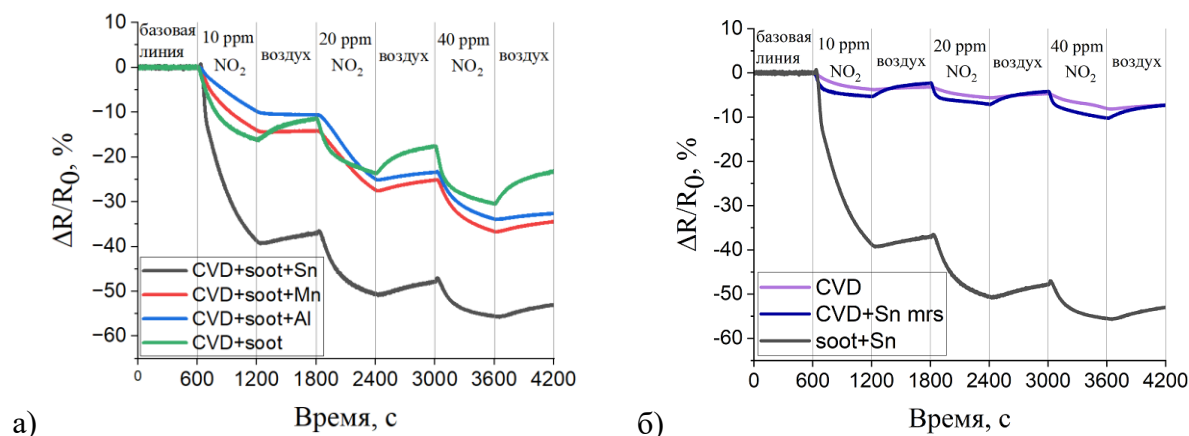


Рис. 1 - Отклик на диоксид азота (а) сенсоров, функционализированных электродуговой сажей с добавками Mn, Sn, Al и (б) с НЧ олова, нанесенными магнетронным распылением.

Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ (грант № 24-19-00357)
<https://rscf.ru/project/24-19-00357/>

[1] Khaniabadi Y.O. et al. // Environmental science and pollution research. 2017. V. 24. P. 2781.

**Оценка процессов взаимодействия глюкозы и кортизола
с проводящим композитом графен – полимер PEDOT:PSS**

А.А. Бузмакова¹, И.В. Антонова^{1,2}, А.И. Иванов¹

¹ *Институт физики полупроводников им. А.В. Ржанова СО РАН,
просп. Акад. Лаврентьева 13, Новосибирск, Россия*

² *Новосибирский государственный технический университет, просп. К. Маркса 20,
Новосибирск, Россия
buzmakovaa01@mail.ru*

DOI: 10.26902/Graphene-25-070

В настоящее время значительный интерес вызывают гибкие носимые сенсоры по причине возможности их использования в качестве миниатюрных аналитических устройств для персонализированной медицины. В данной работе были созданы носимые сенсорные структуры на основе проводящего композита графен – полимер PEDOT:PSS для изучения влияния пота на проводимость структур в условиях непрерывного мониторинга. Обнаружено, что наблюдались пики длительностью 30-40 минут, связанные с повышением уровня глюкозы в поте после приема пищи. Однако, на фоне основных откликов сенсора на глюкозу, также наблюдались дополнительные краткие (1-12 мин) пики, которые коррелировали с различными стрессовыми ситуациями [1]. Существует несколько видов гормонов, которые выступают в качестве индикатора стресса (кортизол, адреналин, норадреналин и дофамин). Как известно, большинство гормонов имеют химический механизм действия, а не электрический, как считалось ранее. В своей работе мы показали, что концентрация гормонов в поте меняется при стрессе. При исследовании откликов сенсора на основной гормон стресса кортизол установлено, что динамика изменения кортизола в поте существенно более быстрая по сравнению с глюкозой. Реакция сенсоров на стресс происходит через адсорбцию гормонов на слое композита и их окислении с появлением дополнительных носителей заряда. Известно, что концентрация гормонов в поте примерно на два порядка ниже, чем глюкозы, что может сказываться на отклике сенсорных структур. Для сравнительного анализа условий тестирования и параметров обнаружения глюкозы и кортизола в поте были исследованы зависимости отклика от площади сенсора. Полученные результаты позволяют сделать вывод, что увеличение площади сенсора от 0,08 см² до 1 см² позволяет сдвинуть приоритет при анализе пота в пользу кортизола, тогда как использование сенсоров с малой площадью делает реакцию с глюкозой доминирующей. Проведена оценка вероятности взаимодействия глюкозы и кортизола с композитом. Полученные значения эффективных сечений взаимодействия в значительной мере определяются размерами молекул и наличием барьеров для физической адсорбции молекул глюкозы или кортизола на частицах графена.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ (грант № 25-19-20035).

[1] Antonova I.V. et al. // J. Mater. Chem. C (in press).

**Исследование влияния различных параметров химической модификации
многостенных углеродных нанотрубок в дихромовой кислоте**

В.В. Головахин, Я.Е. Душкин, А.Г. Баннов

*Новосибирский государственный технический университет,
просп. К. Маркса 20, Новосибирск, Россия*

golovaxin-valera@mail.ru

DOI: 10.26902/Graphene-25-071

Углеродные наноматериалы (УНМ) набирают свою популярность в качестве материалов для различных физико-химических применений (суперконденсаторы, газовые сенсоры, наполнители в полимерных композитах и т.п.) в течение последних 20 лет. С каждым годом растет количество публикаций, посвященных получению из различного сырья и исследованию их свойств. Однако оказывается, что чистые углеродные наноматериалы не всегда обладают ожидаемыми характеристиками и для повышения этих характеристик, и авторы прибегают к различным методам модификации поверхности УНМ.

Получены модифицированные в дихромовой кислоте многостенные углеродные нанотрубки (МУНТ) двух марок (коммерческие МУНТ MWCNT-1020 и MWCNT-4060) при варьировании трех параметров процесса модификации: концентрации кислоты (моль/л), времени модификации (мин), температуры процесса (°C).

Было обнаружено, что во всем диапазоне концентраций (1-6 моль/л) в межслоевое пространство МУНТ был интеркалирован оксид хрома (III). Кроме того, поверхность МУНТ была модифицирована различными кислородсодержащими функциональными группами (карбоксильные, карбонильные, спиртовые (фенольные)).

Полученные материалы испытывали в качестве электродов для суперконденсаторов в трехэлектродной электрохимической ячейки и выявили, что повышение концентрации раствора дихромовой кислоты приводит к переокислению поверхности и для разного типа углеродных наноматериалов изменению удельной емкости от 133 до 470% по сравнению с исходными МУНТ [1].

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

[1] Golovakhin V. et al. //Membranes. 2023. V. 13. N. 8. P. 18.

Влияние структуры фторированного графита на его магнитные свойства**М.А. Гребёнкина, Д.В. Пинаков, А.Н. Лавров, Л.Г. Булушева, А.В. Окотруб***Институт неорганической химии им. А.В. Николаева СО РАН,**просп. Акад. Лаврентьева 3, Новосибирск, Россия**grebenkina@niic.nsc.ru***DOI: 10.26902/Graphene-25-072**

Химическая модификация графита открывает возможности для настройки электрофизических свойств материала в соответствии с требованиями потенциальных приложений. Одним из распространённых вариантов химической модификации графита является фторирование. Фторирование графита приводит к смещению уровня Ферми, разбиению сопряжённой π -системы и появлению запрещённой зоны. С другой стороны, графит обладает слоистой структурой, что делает возможным внедрение молекул в межслоевое пространство. Взаимодействие матрицы на основе графита с внедрёнными молекулами может выразиться в переносе электронной плотности между ними. Магнитные свойства оказываются чувствительными к таким структурным изменениям. Анализ магнитной восприимчивости фторированного графита позволяет определить связь между компонентами магнитных свойств и структурными особенностями исследуемого материала.

В настоящей работе были исследованы магнитные свойства фторированных графитов состава CF_x , где $0,04 < x < 0,52$, с внедрёнными в межслоевое пространство бромом, ацетонитрилом и тетрахлорметаном. Исследуемые образцы были получены с помощью фторирования графита в парах смеси брома и трифторида брома при комнатной температуре. Анализ магнитной восприимчивости фторированных графитов позволил выделить вклады диамагнетизма Ланжевена от атомов углерода и фтора и внедрённых молекул, парамагнетизма Паули, обусловленного наличием электронов проводимости, парамагнетизма Кюри-Вейсса и орбитального диамагнетизма, связанного с наличием сопряжённой π -системы. Орбитальный диамагнетизм обеспечивает большой диамагнитный вклад с характерной температурной зависимостью в магнитные свойства графитоподобных образцов. Моделирование распределения атомов фтора по графеновым слоям для синтеза при комнатной температуре [1] позволяет связать величины орбитального диамагнетизма со средним размером сопряжённых областей. Показано, что вклад орбитального диамагнетизма становится незначительным относительно других компонентов магнитной восприимчивости при степени фторирования $x \geq 0,3$, когда сопряжённая π -система в значительно разбита атомами фтора. Согласно моделированию распределения атомов фтора для появления значимого вклада орбитального диамагнетизма нефторированные участки должны быть образованы не менее, чем 100 гексагонами. Также было показано отсутствие влияния внедрённых молекул на величину орбитального диамагнетизма. Парамагнетизм Кюри-Вейсса вызван переносом электронной плотности на атомы фтора при присоединении фтора к слоям графита, однако, данный вклад не зависит от степени фторирования. Это может быть вызвано тем, что атомы фтора организованы в кластеры, а парамагнитные центры создают только краевые атомы в данных участках.

Авторы благодарят Министерство науки и высшего образования Российской Федерации, проект 125021001790-0.

[1] Yamaletdinov R.D., Nikiforov Y.A., Bulusheva L.G., Okotrub A.V. // *Nanoscale*. 2021. V. 13. P. 1206.

Особенности мозаичных квазикристаллов ограниченных размеров

В.А. Данилин, В.А. Демин, Л.А. Чернозатонский

*Институт биохимической физики им. Н.М. Эмануэля РАН,**ул. Косыгина 4, Москва, Россия**vitalydanilin@gmail.com***DOI: 10.26902/Graphene-25-073**

Цель данной работы – исследование эффекта гигантского смещения центра квазикристалла при небольшом смещении одного из слоев. Смещение центра может в сотни раз превышать реальное смещение слоя. Описание мозаики для двуслойного квазикристаллического графена с углом поворота 30 градусов показано в работе [1]. В результате моделирования данной структуры были получены данные о положении узлов мозаики, расстоянии от них до центра, и смещении слоёв в них. Полученные вычисления являются универсальными для различных квазикристаллов со слоями из гексагональных структур (h-BN, MoS₂).

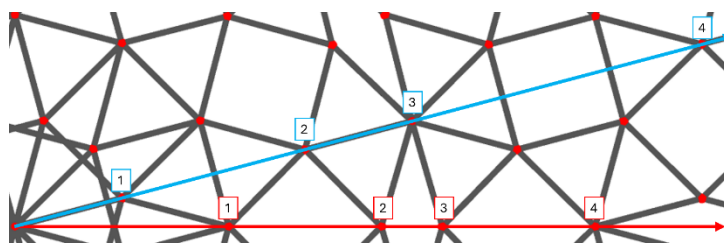


Рис. 1. Мозаика смоделированной двуслойной структуры, красный луч – направление узлов 0°, голубой – 15°.

Например, для графена были получены данные о смещениях слоёв, приведённые на Рис. 2.

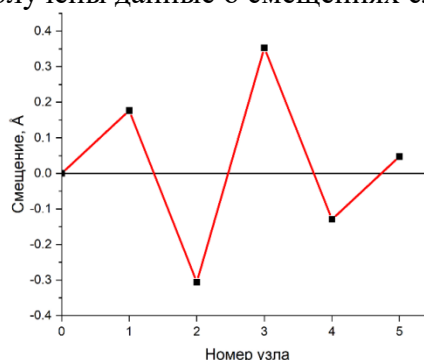


Рис. 2. Полученная величина смещения по оси 0°, необходимая, чтобы центр квазикристалла переместился в соответствующий узел.

Аналогичные расчёты были проведены для трёхслойной структуры с углами поворота слоёв 0, 20, 40 (первый, второй и третий слой, соответственно). В подобном муаровом трехслойном графене [2] было показано существование топологических зон и коррелированных состояний электронного спектра. В результате на структурах пересекающихся графеновых нанолент, моделирующих различные узлы квазикристалла, была показана разница в поведении ветвей электронной зонной структуры. Таким образом, с помощью смещения одного из слоёв на малое расстояние мы можем поменять центр ограниченного квазикристалла (~100 нм), при этом изменится набор узлов в системе, что поменяет её общие характеристики.

[1] Moon P., Koshino M., Son Y.-W. // Phys. Rev. B. 2019. V. 99. N. 16. P. 165430.

[2] Xia L.Q. *et al.* // Nat. Phys. 2025. V. 21. P. 239.

**Фотолюминесценция чистых и функционализированных SWCNT,
покрытых оксидом кремния**

С.А. Дозморов¹, П.М. Калачикова¹, А.Е. Гольдт¹, Ю.Г. Гладуш¹, А.Р. Вильданова¹,
Ф.М. Максимов^{2,3}, А.И. Чернов^{2,3}, А.Г. Насибулин¹

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

² Московский физико-технический институт,

Институтский пер. 9 стр.3, Долгопрудный, Московская обл., Россия

³ Российский квантовый центр, Сколково, Большой бульвар д. 30 стр. 1, Москва, Россия
sergey.dozmorov@skoltech.ru

DOI: 10.26902/Graphene-25-074

Химическая модификация однослойных углеродных нанотрубок (SWCNT) является универсальным инструментом для настройки их флуоресцентных свойств в соответствии с требованиями к источникам квантового света с однофотонной эмиссией при комнатной температуре. Функционализация поверхности нанотрубки ковалентно присоединенными функциональными группами создает излучательные состояния при более низких уровнях энергии [1], что позволяет получать яркое однофотонное излучение на телекоммуникационных длинах волн (1300–1500 нм) [2]. Флуоресценция нанотрубок чрезвычайно чувствительна к внешним факторам, таким как адсорбированный кислород и наличие ионов металлов, которые гасят флуоресценцию нанотрубок. Использование барьерного слоя на поверхности нанотрубок дает прекрасную возможность защитить их от влияния окружающей среды и сохранить свойства нанотрубок. Покрытие слоем оксида кремния [3] кажется одним из наиболее многообещающих подходов для защиты нанотрубок.

Мы разработали новый подход к эффективному увеличению сигнала фотолюминесценции (ФЛ) от отдельных однослойных углеродных нанотрубок (SWCNT) путем защиты их поверхности слоем SiO₂, синтезированным модифицированным методом Штёбера. Ковалентно функционализированные (6,5)-SWCNT с использованием соли арилдиазония, покрытые слоем диоксида кремния, демонстрируют пики излучения от отдельных дефектных участков в спектральном диапазоне 1100 – 1300 нм. Поскольку сигнал ФЛ сильно зависит от диэлектрического окружения, оболочка диоксида кремния создает благоприятные условия для конфигураций со смещенным в красную сторону излучением при ~1260 нм. Такой подход открывает огромный потенциал для поддержки дефектов sp³ на нанотрубках большего диаметра d > 0,9 нм при разработке квантовых источников света комнатной температуры, способных работать на телекоммуникационных длинах волн.

Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ (грант № 22–13–00436).

[1] Przypis L. *et al.* //Sci. Rep. 2020. V. 10. N. 1. P. 19877.

[2] He X. *et al.* //Nature Photonics. 2017. V. 11. N. 9. P. 577.

[3] Wojdel J. C., Bromley S. T. // J. Phys. Chem. B. 2005. V. 109. N. 4. P. 1387.

***In situ* отражательная электронная микроскопия процесса графитизации поверхности 6H-SiC(0001) при высокотемпературной отжиге**

Д.Е. Дураков^{1,2}, А.С. Петров^{1,2}, Д.И. Роголо^{1,2}, А.А. Макеева¹, Д.А. Насимов¹,
Д.Ф. Никифоров^{1,2}, Н.Н. Курусь¹, А.Г. Милёхин¹, Д.В. Щеглов¹, А.В. Латышев^{1,2}

¹Институт физики полупроводников им. А.В.Ржанова СО РАН,
просп. Акад. Лаврентьева 13, Новосибирск, Россия

²Новосибирский государственный университет, ул. Пирогова 1, Новосибирск, Россия
durakov@isp.nsc.ru

DOI: 10.26902/Graphene-25-075

Сложность создания электронных приборов на основе графена заключается в получении его качественных слоёв на диэлектриках, в связи с этим перспективным является методом термического разложения карбида кремния (SiC). Быстрая сублимация кремния в вакууме усложняет контроль качества и количества слоёв графена, но *in situ* наблюдение методом ОЭМ помогает управлять процессом графитизации поверхности.

В работе были проведены эксперименты по высокотемпературному резистивному отжигу подложек 6H-N SiC(0001) ($\sigma = 0.02\text{--}0.1$ Ом/см). Для *ex situ* анализа морфологии образцов применялась атомно-силовая микроскопия (АСМ, Bruker Multimode 8). Для определения стехиометрического состава поверхности образцов измерялся спектр комбинационного рассеяния света (КРС) с помощью спектрометра (XploRa Plus, Horiba, $\lambda = 532$ нм). Для определения областей с разным стехиометрическим составом использовался сканирующий электронный микроскоп (СЭМ, Hitachi SU8220, ускоряющее напряжение 2 кВ).

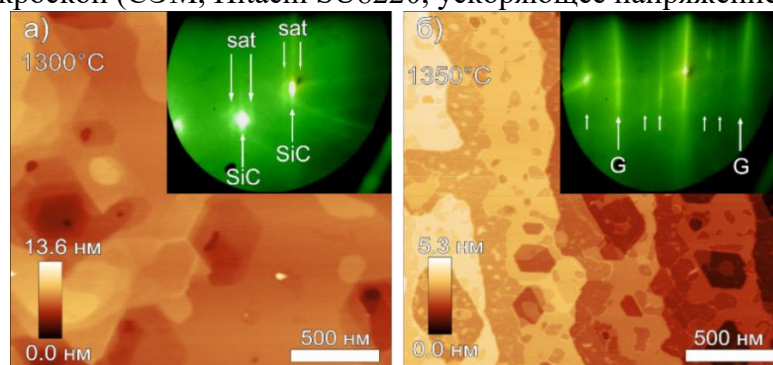


Рис. 1 АСМ-изображение поверхности образцов после отжига (а) в течении 5 мин при $T = 1300^\circ\text{C}$ и (б) в течении 4 мин при $T = 1350^\circ\text{C}$. На вставках изображены картины ДБОЭ во время отжига, соответствующие АСМ-изображениям.

Впервые был записан процесс получения ступенчато-террасированных поверхностей 6H-SiC с высотой ступеней 0.75 нм методом ОЭМ, для получения которой образцы отжигались 20 мин при $T = 1200^\circ\text{C}$. Методом *in situ* дифракции быстрых электронов на отражение (ДБЭО) установлена зависимость морфологии поверхности SiC от длительности отжига. Комплексный *ex situ* анализ (АСМ, СЭМ, КРС) образцов после отжига позволил определить оптимальные температурные режимы формирования буферного слоя и однослойного графена. Было установлено, что для формирования буферного слоя (Рис. 1(а)) необходимо отжигать образцы в течении 5 мин при $T = 1300^\circ\text{C}$ до появления спутных рефлексов, соответствующих сверхструктуре $(6\sqrt{3} \times 6\sqrt{3}) R30^\circ$, изображённых на вставке Рис. 1(а). Для формирования монослоя графена (Рис. 1(б)) необходимо отжигать образец до исчезновения дифракционных рефлексов, соответствующих буферному слою, изображённых на вставке Рис. 1(б). При температуре $T = 1350^\circ\text{C}$ монослой графена образуется за 4 минуты.

Работа выполнена на оборудовании ЦКП «Наноструктуры». Эксперименты и диагностика методом КРС выполнены при поддержке государственного задания (проект № FWGW-2025-0014). Диагностика методами СЭМ и АСМ выполнена при финансовой поддержке РНФ (грант № 19-72-30023).

Исследование влияния кислородных групп на термоэлектрические свойства полимерных композитов с одностенными нанотрубками**В.А. Ермаков¹, Б. Ч. Холхоев², В.Ф. Бурдуковский², В.А. Кузнецов^{1,3}**¹ *Институт неорганической химии им. А.В. Николаева СО РАН,
просп. Акад. Лаврентьева 3, Новосибирск, Россия*² *Байкальский институт природопользования СО РАН,
ул. Сахьяновой 6, Улан-Удэ, Россия*³ *Новосибирский государственный технический университет,
просп. К. Маркса 20, Новосибирск, Россия**vova.ermakov111@gmail.com***DOI: 10.26902/Graphene-25-076**

В последнее время особое внимание уделяется разработке и исследованию электропроводящих полимерных композиционных материалов в качестве приложений гибкой сенсорной электроники. Подходящей матрицей для создания таких композитов являются диэлектрические полимеры из семейства полибензимидазолов, поскольку они способны сохранять высокие значения модуля упругости до температуры 350 °С. Одностенные углеродные нанотрубки (ОУНТ) являются подходящими электропроводящими наполнителями для композитов на основе диэлектрической полимерной матрицы из-за возможности создавать устойчивые коллоидные дисперсии в растворах полимеров, а также высокого аспектного соотношения нанотрубок.

В рамках данной работы исследованы температурные зависимости электросопротивления и коэффициента термоЭДС электропроводящих полимерных композитов на основе диэлектрической полимерной матрицы представителя семейства полибензимидазолов поли-2,2'-*п*-оксидифенилен-5,5'-дибензимидазол (ОПБИ) с добавлением электропроводящего наполнителя в виде ОУНТ с различным массовым содержанием. Для получения композитов были сформированы коллоидные дисперсии ОУНТ в растворе полибензимидазола в растворителе *N*-метил-2-пирролидоне (МП). Для этого порошок ОУНТ подвергали ультразвуковой обработке в растворе ОПБИ в МП с дальнейшей ступенчатой сушкой. В итоге были получены композиты с массовым содержанием нанотрубок 1, 2, 3 и 5 %.

По литературным данным известно, что нанотрубки, взятые в условиях комнатного воздуха, имеют *p*-тип проводимости из-за наличия на поверхности нанотрубок акцепторной примеси в виде кислорода [1] и, как следствие, положительный коэффициент термоЭДС. В процессе температурных отжигов в условиях высокого вакуума при температуре около 100 °С зависимости коэффициента термоЭДС и электросопротивления начинают отклоняться от регулярного хода и при температуре 180 °С происходит смена знака коэффициента термоЭДС с положительного на отрицательный, что может свидетельствовать об удалении акцепторной примеси с нанотрубок. При возвращении образцов в условия комнатного воздуха происходит адсорбция кислорода и постепенная релаксация электросопротивления и коэффициента термоЭДС к исходным значениям, но, ввиду низкого коэффициента диффузии при комнатных условиях, релаксация является длительной. В процессе циклических отжигов в условиях комнатного воздуха (до 160 °С) и высокого вакуума (до 300 °С при давлении не более 0,001 Па) происходит перераспределение акцепторной примеси на поверхности углеродных нанотрубок и коэффициент термоЭДС смещается в положительную область с каждым последующим циклом. При дальнейшем нагреве образцов в высоком вакууме до 350 °С коэффициент термоЭДС возвращается к исходному значению, полученному после первого отжига, что может говорить о максимальном удалении акцепторной примеси с нанотрубок.

*Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 24-79-10223,
<https://rscf.ru/project/24-79-10223/>.*

[1] Collins P.G., Bradley K., Ishigami M., Zettl A. // Science. 2000. V. 287. P. 1801.

Материалы на основе MoS₂ и rGO для низкотемпературных литий- и натрий-ионных аккумуляторов

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

Институт неорганической химии им. А.В. Николаева СО РАН,

просп. Акад. Лаврентьева 3, Новосибирск, Россия

kotsun@niic.nsc.ru**DOI: 10.26902/Graphene-25-077**

Литий- и натрий-ионные аккумуляторы (ЛИА и НИА) страдают от значительной деградации электрохимических характеристик при низких температурах из-за ограниченной диффузии металл-иона, значительного снижения ионной проводимости электролита и пленки поверхностного электролитного слоя. В связи с этим актуальной задачей является разработка высокоэффективных и стабильно работающих анодных материалов в широком диапазоне температур.

Благодаря своей слоистой структуре с большим расстоянием между слоями и высокой теоретической емкости (669 мАч/г) MoS₂ является перспективным анодным материалом. Однако использование MoS₂ ограничивается низкой электропроводностью и необратимой деградацией во время долговременной работы. Создание гибридов MoS₂ с углеродом позволяет стабилизировать анодный материал, приводит к уменьшению внутреннего сопротивления при взаимодействии с металл-ионом и увеличению обратимости электрохимических реакций.

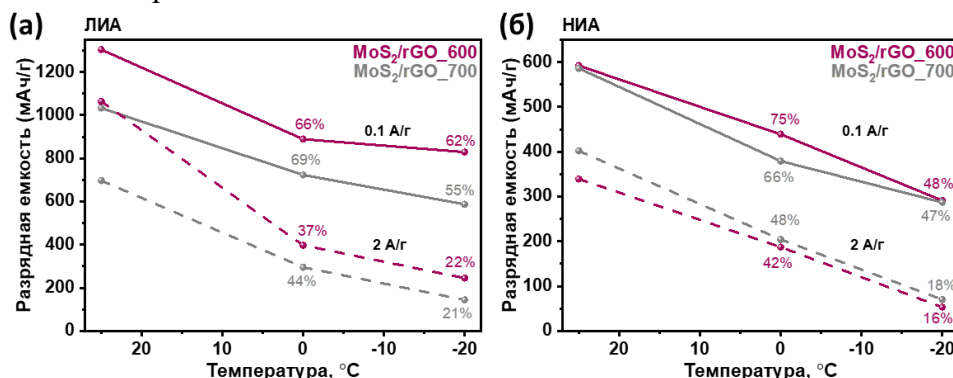


Рис. 1. Удельные емкости MoS₂/rGO в ЛИА (а) и НИА (б) при плотностях тока 0.1, 2 А/г при температурах 25, 0 и -20 °C.

В данной работе гибридные материалы, получены быстрым термолизом аэрогелей тетратиомолибдата аммония и оксида графена при 600 и 700 °C. Структура и состав материалов были охарактеризованы методами РЭМ, ПЭМ, КРС, РФА и РФЭС. Из образцов были собраны электрохимические полужайки, с металлическим литием и натрием в качестве противоэлектрода. Электрохимические испытания проведены при температурах 25, 0 и -20 °C. Гибрид MoS₂/rGO_600 продемонстрировал более высокие удельные емкости в ЛИА – 1370 мАч/г, 835 мАч/г и 711 мАч/г при плотности тока 0.1 А/г и температурах 25, 0 и -20 °C (Рис. 1а). При увеличении плотности тока до 2 А/г сохранение емкости составило 78 и 34% при 25 °C и -20 °C. В НИА гибрид MoS₂/rGO_700 показал лучшую удельную емкость – 550 мАч/г при 0.1 А/г и 400 мАч/г при 2 А/г при 25 °C (Рис. 1б), а при снижении температуры до -20 °C и при увеличении плотности тока сохранение емкости составило ~48 и 17%.

Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ и Министерства науки и инновационной политики Новосибирской области в рамках научного проекта (грант № 24-23-20115).

Лазерное производство дифракционных структур на основе дихалькогенидов переходных металлов

А.О. Калганова, А.В. Аверченко, И. А. Салимон, Е.В. Жаркова, М.Х. Аль-Сардар,
О.А. Аббас, П.Г. Лагудакис, С. Маилиз

Сколковский институт науки и технологии, Большой бульвар 30 стр.1, Москва, Россия
arina.kalganova@skoltech.ru

DOI: 10.26902/Graphene-25-078

Дихалькогениды переходных металлов (ДПМ) представляют большой интерес для применения в фотонике и оптике из-за их высокого показателя преломления, оптической анизотропии, нелинейности и возможности композиционной настройки электронных и фотонных характеристик. Интеграция этих материалов в фотонные устройства обычно требует точного микроstructuring. Общепринятым подходом к созданию такого рода микроstructures является обработка чешуек материала сфокусированным ионным/электронным пучком [1]. Однако это порождает сложности, связанные с необходимостью точной фокусировки луча и его аккуратного позиционирования для достижения заданных характеристик изготавливаемых структур.

Недавно было показано, что локализованное лазерное облучение однокомпонентных жидких прекурсоров ($[(\text{NH}_4)_2\text{MoS}_4]$, $[(\text{NH}_4)_2\text{WS}_4]$, растворенных в органических растворителях) позволяет напрямую синтезировать ДПМ на облученных участках. Данный подход позволяет производить поликристаллические микроstructures MoS_2 , WS_2 , а также их сплавы и гетероstructures непосредственно на требуемых подложках [2, 3]. Процесс основан на термической диссоциации прекурсора под воздействием лазеров видимого (532 нм) и УФ (244 нм) диапазонов. Локальное низкоинтенсивное лазерное излучение способствует химическому разложению исходной пленки-прекурсора с образованием аморфных соединений молибдена и вольфрама, которые нерастворимы в органических растворителях и могут быть подвергнуты последующей обработке с получением поликристаллических 2D ДПМ. Данный эффект делает возможным избирательное удаление необлученных участков пленки-прекурсора, что позволяет изготавливать микроstructures ДПМ фотолитографическим способом.

Важно отметить, что эта процедура позволяет разделить этапы формирования рисунка и синтеза, что делает возможным отдельную оптимизацию каждого этапа без ущерба для производительности. Снижение интенсивности лазерного излучения приводит к понижению теплового режима, что позволяет изготавливать микроstructures MS_3 . Превращение аморфных микроstructureных соединений в поликристаллические ДПМ осуществляется на втором этапе либо путем повторного лазерного облучения с более высокой интенсивностью, либо посредством термического отжига в печи с использованием инертной атмосферы. Данный подход позволяет производить многослойные поликристаллические микроstructures MoS_2 , WS_2 . Более того, использование интерферометрической печати в процессе нанесения рисунка позволяет производить дифракционные решетки с контролируемым периодом. При применении УФ-интерферометрического облучения, были достигнуты периоды в 150 нм, состоящие из треков MoS_2 шириной ~90 нм и длиной ~800 μm , на поверхности подложек Si/SiO₂ и LiNbO₃. С использованием этого подхода также были изготовлены двумерные дифракционные структуры, такие как сетки и линзы Френеля.

[1] Franz J. *et al.* // Opt. Express. 2019. V. 27. № 24. P. 35475.

[2] Abbas O.A. *et al.* // Sci. Rep. 2021. V. 11. № 1. P. 5211.

[3] AVerchenko A.V. *et al.* // Mater. Today Adv. 2023. V. 17. № 1. P. 100351.

Адсорбция водорода на графеновых нанолентахМ.В. Каплун, Е.В. Аникина, В.П. Бескачко*Южно-Уральский государственный университет,**просп. Ленина 76, Челябинск, Россия**kaplunmv@susu.ru***DOI: 10.26902/Graphene-25-079**

В настоящее время широко изучается проблема хранения водорода для водородной энергетики. Одним из перспективных материалов для решения этой проблемы является графен, а также графеноподобные структуры, в частности, графеновые наноленты (GNR, graphene nanoribbons).

В работе представлены результаты численного моделирования сорбции водорода на графеновых нанолентах. Расчеты проводились с помощью теории функционала плотности (DFT), с использованием программного пакета SIESTA [1]. Адсорбция водорода исследовалась на чистых и декорированных металлами (Ca, Li, Ti) GNR. Рассматривались GNR двух видов: AGNR (край GNR формы «кресло») и ZGNR (край GNR формы «зигзаг»), также для каждого типа GNR варьировалась ширина наноленты. В ходе исследования для каждого типа системы отслеживались изменение геометрии системы и полная энергия систем, а также рассчитывалась энергия связи с учетом поправок Бойса-Бернарди к ошибке суперпозиции базисного набора.

Результаты исследования показали, что энергия адсорбции водорода на декорированных металлами GNR больше, чем на чистых графеновых нанолентах и достигает нескольких десятых эВ на одну молекулу водорода, значение энергии зависит от вида и ширины GNR.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 25-22-20023, <https://rscf.ru/project/25-22-20023/>.

[1] Soler J.M. *et al.* // J. Phys.: Cond. Matter. 2002. V. 14. N. 11. P. 2745.

Управляемый затвором фотодетектор на основе полевого транзистора с каналом из одностенных углеродных нанотрубок, модифицированных красными флуоресцентными белками mKate2

А.С. Кудрявцева^{1,2}, Н.П. Некрасов³, И.И. Бобринецкий¹, П.И. Никитин²

¹Московский физико-технический, Институтский переулок 9 стр.3, Долгопрудный Россия

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

³Национальный исследовательский университет «МИЭТ»,

площадь Шокина 1, Москва, Зеленоград, Россия

lekassy2000@gmail.com

DOI: 10.26902/Graphene-25-080

Оптоэлектронные устройства, основанные на взаимодействии фотоактивных биологических объектов с чувствительными наноматериалами, вызывают большой интерес с точки зрения экологичной и недорогой электроники следующего поколения. Углеродные нанотрубки (УНТ) и флуоресцентные белки (ФБ) благодаря своим уникальным оптическим и структурным свойствам являются перспективными материалами для этих задач [1].

В данной работе представлен фотодетектор на основе полевого транзистора с каналом из одностенных углеродных нанотрубок, модифицированных красными флуоресцентными белками mKate2. Иммобилизация белка на поверхность наноструктуры осуществлялась с помощью линкера РВАСЕ, обеспечивающего π - π стекинг с УНТ и ковалентную сшивку через реакцию NHS-эфира с аминогруппами на поверхности белка [2].

Исследование светочувствительности фотодетектора демонстрирует наличие двух конкурирующих механизмов отклика: медленного отрицательного и быстрого положительного с реакциями на засветку в течение 670 и 1 с, соответственно. Переключение между этими режимами осуществляется за счёт изменения напряжения, подаваемого на затвор транзистора. Положительный фотоотклик обусловлен эффектом фотогейтинга и является широкополосным, тогда как отрицательный является селективным к одной длине волны и связан с переносом электронов из хромофора и накоплением положительных зарядов на границе раздела УНТ-ФБ.

Разработанные технологические принципы формирования биоконъюгатов с наноразмерными структурами перспективны для функционализации электрореактивных и коллоидных магнитных наночастиц для применения в молекулярной нанобиосенсорике.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант № 25-12-00373).

[1] Gwyther R.E.A. *et al.* // Adv. Funct. Mater. 2022. V. 32. № 22. P. 2112374.

[2] Kudriavtseva A.S. *et al.* // Adv. Electron. Mater. 2025. V. 11. № 3. P. 2400329.

**Массивы вертикально ориентированных углеродных нанотрубок
на алюминиевой фольге**

А.М. Кондранова, Д.В. Городецкий, А.В. Гусельников, А.В. Окотруб
*Институт неорганической химии им. А.В. Николаева СО РАН,
просп. Акад. Лаврентьева 3, Новосибирск, Россия*
a.kondranova@gmail.com

DOI: 10.26902/Graphene-25-081

В настоящее время особый интерес вызывает технология химического осаждения газовой фазы (CVD) для синтеза массивов вертикально ориентированных углеродных нанотрубок (УНТ) на металлических подложках. Они обладают лучшей тепло- и электропроводностью и более экономичны. Рост УНТ на алюминиевой фольге снижает сопротивление электрическому или тепловому переносу на границе раздела УНТ и подложки. Такие материалы имеют возможность высокотехнологических применений от суперконденсаторов до автоэлектронных эмиттеров. Одной из ключевых задач является исследование влияния оксидных и карбидных слоёв ($\text{Al}/\text{Al}_2\text{O}_3/\text{Al}_4\text{C}_3$) на заподышеобразование и синтез УНТ. В данной работе использовалась алюминиевая фольга «Саянская» толщиной 9, 14, 20 и 30 микрон (ГОСТ 745-2014) в качестве подложки для синтеза массивов вертикально ориентированных УНТ. Синтез УНТ осуществлялся при помощи CVD на алюминиевых фольгах, предварительно отожжённых при температуре 800°C в аргоновой среде и при пониженном давлении 10^{-3} мбар. В качестве предшественника катализатора использовался ферроцен в растворе толуола (4 масс. %). Было проведено исследование морфологии и структурных характеристик полученных УНТ в зависимости от температуры синтеза, толщины фольги, скорости подачи газов и концентрации реакционной смеси. Данные РФЭС подтвердили образование оксидных и карбидных слоёв, что препятствует плавлению алюминиевой подложки и обеспечивает стабильность структуры. Дальнейшее развитие методов роста УНТ на алюминиевой фольге перспективно для создания автоэлектронных эмиттеров, компонентов терагерцовой оптики и для других областей нанотехнологий.

Оптические свойства осажденных функционализированных однослойных углеродных нанотрубок

Ф.М. Максимов^{1,2}, А.Е. Гольдт³, С.А. Дозморов³, П. Калачикова³, А. Вильданова³,
А.В. Морозов³, Ю. Гладуш³, А.Г. Насибулин³, А.И. Чернов^{1,2}

¹Российский квантовый центр, Инновационный центр «Сколково»,
Большой бульвар 30 стр.1, Москва, Россия

²Центр фотоники и двумерных материалов,

Московский физико-технический институт, Долгопрудный, Россия

³Сколковский институт науки и технологии, Большой бульвар 30 стр.1, Москва, Россия
maksimov.fm@phystech.edu

DOI: 10.26902/Graphene-25-082

Однослойные углеродные нанотрубки (ОУНТ) представляют собой перспективный низкоразмерный материал, который может быть использован в качестве основы для источников одиночных фотонов. Главные преимущества таких излучателей заключаются в возможности генерации одиночных фотонов при комнатной температуре, а также в выборе длины волны излучения в ближнем ИК-диапазоне за счёт подбора хиральности нанотрубки. Это позволяет, например, настраивать излучение на телекоммуникационную длину волны 1550 нм [1]. Источник одиночных фотонов является ключевым элементом для устройств квантовой связи и квантовых вычислений. Функционализированные ОУНТ — одна из твёрдотельных платформ для реализации таких источников. Для этого необходимо разработать методы синтеза с контролем оптических свойств [2], провести функционализацию нанотрубок, защитить их от внешней среды [3], а также усилить однофотонные свойства с помощью усиливающих метаповерхностей.

В данной работе исследуются оптические свойства осаждённых однослойных углеродных нанотрубок и методы усиления их сигнала в ближнем ИК-диапазоне. ОУНТ (6,5) были функционализированы при помощи соли арилдиазония, что привело к появлению смещённого в красную область пика фотолюминесценции (ФЛ). Его положение зависит от геометрии присоединения sp^3 дефекта, в этом случае - «ortho+». Было продемонстрировано, что при создании оболочки из SiO_2 , изолирующей ОУНТ от подложки, изменяется вид спектра ФЛ. Это выражено появлением пика, соответствующим sp^3 дефекту типа «ortho++». Также было показано усиление сигнала фотолюминесценции при осаждении нанотрубок на кремниевую метаповерхность. Применение защитного покрытия из SiO_2 и использование метаповерхностей улучшает оптические характеристики нанотрубок как источников одиночных фотонов, работающих при комнатной температуре и на телекоммуникационной длине волны.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации, соглашение № 075-15-2024-680.

[1] He X. *et al.* // Nat. Photon. 2017. V. 11. № 9. P. 577-582.

[2] Ilatovskii D.A. *et al.* // Carbon. 2024. V. 218. P. 118725.

[3] Dozmorov S.A. *et al.* // Surf. Interfaces. 2025. P. 106674.

Многостенные углеродные нанотрубки как эффективные электрокатализаторы восстановления кислорода до пероксида водорода.**Н.В. Мальцева^{1,2}, М.В. Лебедева^{1,2}, С.И. Мосеенков²,****А.В. Заворин,² В.Л. Кузнецов², Д.В. Козлов^{1,2}**¹Новосибирский государственный университет, ул. Пирогова 1, Новосибирск, Россия²Институт катализа СО РАН, просп. Акад. Лаврентьева 5, Новосибирск, Россияmaltseva.n.v@catalysis.ru**DOI: 10.26902/Graphene-25-083**

H₂O₂ находит широкое применение в промышленности, сельском хозяйстве, медицине и во многих других областях. В настоящее время, его коммерческое производство основано на окислении антрахинона, с использованием никелевых или палладиевых катализаторов. Высокая стоимость катализаторов и органических растворителей побуждает исследователей искать более дешёвые и экологически чистые методы производства H₂O₂. Одним из таких методов является электрохимическое восстановление кислорода, которое помимо прочего способно обеспечить получение H₂O₂ на месте его использования, что сокращает затраты, связанные с транспортировкой и хранением. При этом во многих случаях достаточно получать водные растворы H₂O₂ низкой, до 1 масс. %, концентрации.

В настоящее время, углеродные материалы рассматриваются как одни из самых перспективных катализаторов реакции электровосстановления кислорода, так как могут проводить этот процесс с высокой селективностью к H₂O₂. Каталитическая активность углеродных материалов определяется текстурными, структурными характеристиками и химией поверхности.

В данной работе окисленные и модифицированные убихиноном многостенные углеродные нанотрубки (МУНТ) исследовали в качестве электрокатализаторов получения пероксида водорода. МУНТ синтезированы разложением этилена на биметаллическом FeCo катализаторе при T 680 °C. Для получения катализаторов предварительно окисленные азотной кислотой МУНТ восстанавливали в потоке водорода при температурах 300–500 °C. Модификация убихиноном осуществлялась путём его адсорбции на поверхность нанотрубок восстановленных при 300 °C. Полученные материалы были охарактеризованы набором физико-химических методов.

Показано, что увеличение температуры восстановления приводит к постепенному изменению состава кислородсодержащих групп с преобладанием все более восстановленных форм и уменьшению содержания кислорода. Это приводит к увеличению массовой активности в 2.5–3 раза и селективности катализаторов к H₂O₂ с 65% до 75–78%. Максимальный выход, 340 ммоль/Г_{кат}·ч, наблюдается на образце, приготовленном при 300 °C, вероятно, вследствие удаления карбоксильных групп, которые могут способствовать разложению пероксида водорода. Дальнейшее увеличение температуры восстановления приводит к уменьшению количества активных центров из-за изменения дефектности поверхности, что снижает выход H₂O₂ на 47% до 180 ммоль/Г_{кат}·ч.

Модификация убихиноном не влияет на селективность образования H₂O₂ и приводит к некоторому снижению выхода (до 205 ммоль/Г_{кат}·ч), однако, позволяет существенно повысить стабильность катализаторов. Для исходного МУНТ через 12 часов электросинтеза H₂O₂ наблюдается падение тока на ~80%, в то время как на модифицированных катализаторах за 19 часов ток снижается всего на 20%.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования РФ в рамках государственного задания для Новосибирского государственного университета, проект № FSUS-2025-0014.

СВЧ функциональные материалы на основе углеродных нанотрубок, диспергированных на ценосферах**З.Н. Нуриахметов^{1,2,3}, О.А. Нерушев², Д.В. Смовж², Ю.Д. Черноусов¹**¹*Институт химической кинетики и горения СО РАН,
ул. Институтская 3, Новосибирск, Россия*²*Институт теплофизики им. С.С. Кутателадзе СО РАН,
просп. Акад. Лаврентьева 1, Новосибирск, Россия*³*Новосибирский государственный университет, ул. Пирогова 1, Новосибирск, Россия
zaur.nuriakhmetov@gmail.com***DOI: 10.26902/Graphene-25-084**

Ценосферы – полые алюмосиликатные микросферы, являющиеся крупнотоннажным побочным продуктом сжигания угля на ТЭЦ. Благодаря низкой плотности, сферической форме и химической инертности, они находят применение в качестве легковесных наполнителей в различных композиционных материалах, включая бетоны, пластмассы и металлы [1]. Углеродные нанотрубки (УНТ), в свою очередь, являются уникальным наноматериалом с выдающимися механическими, электрическими и тепловыми свойствами, что делает их перспективными для создания функциональных композитов, в том числе для поглощения электромагнитного излучения. Однако эффективное использование УНТ часто затруднено их склонностью к агрегации и сложностью равномерного распределения в матрице. Целью данной работы является исследование электромагнитного поглощения композиционных материалов на основе гибридного наполнителя УНТ-на-ценосфере, в таком наполнителе УНТ уже закреплены на более крупных ценосферах, что способствует более равномерному распределению нанотрубок в объеме матрицы и снижению их склонности к агрегации. Одним из методов создания такого гибридного наполнителя является растворное осаждение УНТ на поверхность ценосфер, основанный на их электростатическом взаимодействии в водной суспензии, обусловленном разными знаками их дзета-потенциалов [2-3]. Эффективность такой методики диспергирования была продемонстрирована для технического углерода, одностенных и многостенных УНТ, что подтверждает универсальность подхода. Альтернативным методом создания гибридного наполнителя является синтез УНТ непосредственно на поверхности ценосферы. Для этого на поверхность ценосфер предварительно наносится каталитический слой железа методом магнетронного распыления. Затем методом химического осаждения из газовой фазы производился синтез УНТ на металлизированной поверхности ценосфер. Изображения сканирующей электронной микроскопии наполнителей подтверждают эффективность предложенных методик. Для измерения электромагнитного поглощения были изготовлены образцы на основе полиуретана и созданных гибридных наполнителей. Измерения проводились в диапазоне частот 300 кГц – 13,51 ГГц, толщина образцов составляла 4 мм. Показано, что использование ценосфер в качестве носителей для УНТ эффективно увеличивает поглощения за счёт более равномерного распределения УНТ. Полученные результаты открывают перспективы для создания легковесных и функциональных материалов для защиты от электромагнитного излучения и других радиочастотных приложений на основе ценосфер и УНТ.

Исследование выполнено при поддержке РНФ (проект № 24-19-00357).

- [1] Zanjad N., Pawar S., Nayak C. // Mater. Today: Proc. 2022. V. 62. P. 2185.
[2] Alsharef J.M.A. et al. // Nano Hybrids Composites. 2019. V. 26. P. 8.
[3] Wang Z. et al. // J. Clean. Prod. 2024. V. 470. P. 143302.

Расчет зонных структур алмазно-графеновых композиций в технике стационарного $\hat{G}$ -оператораИ.В. Орешко^{1,2}, Н.И. Алексеев^{1,2}, В.И. Зубков¹, Н.Н. Жогаль¹, А.В. Соломникова¹¹СПбГЭТУ «ЛЭТИ» им. В.И. Ульянова (Ленина),

ул. Профессора Попова 5, Санкт-Петербург, Россия

²ФТИ им. А.Ф. Иоффе, ул. Политехническая 26, Санкт-Петербург, Россияivanoreskho02@gmail.com**DOI: 10.26902/Graphene-25-085**

Уникальные свойства алмаза делают его одним из наиболее перспективных материалов силовой и высокочастотной электроники, однако применение алмаза ограничено большой шириной запрещенной зоны (E_g) и отсутствием неглубоких примесей, что затрудняет легирование. Альтернативным способом уменьшения E_g видится использование стыковки алмаза с графеновыми листами (алмазно-графеновая композиция), описанной еще в работах [1-2].

В данной работе нами были проведены теоретические исследования зонных структур алмазно-графеновых композиций двух типов: с графеновыми листами, ортогональными плоскости (111) гидрированного алмаза (Рис. 1(а)) и растущими под углом к этой плоскости с кромок вицинальной поверхности, скошенной к (111) под необходимым углом (Рис. 1(б)),

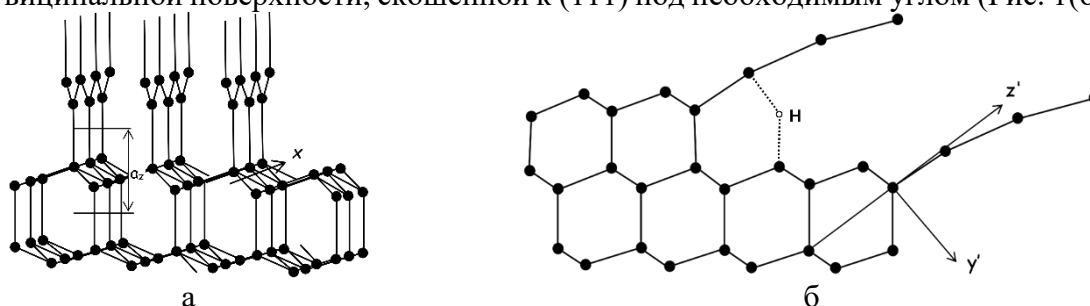


Рис. 1. Схема рассматриваемых алмазно-графеновых структур: (а) – ортогональный рост графена, (б) – рост графена с кромок алмазной матрицы

Расчет зонных структур проводился методом стационарного гриновского оператора ($\hat{G}$). Результаты расчетов показывают, что для композиции с ортогональным ростом графена наблюдается более простая зонная структура с единственной запрещенной зоной шириной ~ 1.2 эВ. При «угловом» расположении графена получаются две запрещенные зоны ~ 0.5 и 3 эВ, отделенные друг от друга узкой зоной, связанной с водородом. Таким образом, обе конфигурации являются узкозонными полупроводниками. Важно также то, что при росте графеновых слоев с кромок алмазных ступеней E_g практически не регулируется и определяется расстоянием между ступенями, так что возникающие графеновые слои практически сразу же слипаются в графит.

Исследование проводилось в рамках проекта № FSEE-2024-0005 (государственное задание Министерства науки и высшего образования Российской Федерации № 075-00003-24-00).

[1] Lambrecht W.R.L. *et al.* // Nature. 1993. V. 364. № 6438. P. 607.

[2] Hembram K. *et al.* // Mater. Horiz. 2020. V. 7. № 2. P. 470.

Высокодисперсный никель на азотсодержащем углероде, полученном термической обработкой аммиаком, для дегидрирования муравьиной кислотыА.Д. Панфилова¹, Ю.В. Федосеева¹, Д.А. Булушев², А.В. Окотруб¹, Л.Г. Булушева¹¹ Институт неорганической химии им. А.В. Николаева СО РАН,

просп. Акад. Лаврентьева 3, Новосибирск, Россия

² Институт катализа им. Г.К. Борескова СО РАН,

просп. Акад. Лаврентьева 5, Новосибирск, Россия

nishchakova@niic.nsc.ru**DOI: 10.26902/Graphene-25-086**

Катализаторы на основе никеля являются одними из наиболее часто используемых в реакциях гетерогенного катализа. Электронное состояние и структура никелевого центра напрямую влияют на эффективность (активность, селективность, стабильность) катализатора в условиях той или иной реакции. Моноатомные Ni-N₃₋₅ центры уже зарекомендовали себя как высокостабильные катализаторы различных реакций гидрирования и дегидрирования [1–3], однако достижение высоких содержаний металла (>4 масс.%) в данном состоянии при сохранении простоты синтеза такого катализатора напрямую зависит от материала носителя.

В данной работе в качестве носителя был использован азотсодержащий пористый углеродный материал (N-ПУМ). Встраивание азота в структуру углеродного материала происходило методом постсинтетической обработки газообразным NH₃ при повышенной температуре. Для этого, исходный образец был синтезирован методом темплатного CVD из этанола при 800 °С. После отмыwania от темплатных частиц, полученный ПУМ был фторирован в парах смеси 10 масс.% BrF₃ в Br₂ для более эффективного встраивания азота. Далее, дефторирование фторсодержащего ПУМ происходило при варьировании температуры и длительности обработки, а также скорости потока газообразного NH₃. Таким образом, оптимальными условиями встраивания аммиака в материал, содержащий 33.7 ат.% фтора преимущественно в виде C–F групп, являлись 400 °С при 30 минутной обработке потоком аммиака 120 мл/мин. В данных условиях удалось не только сохранить развитую поверхность исходного материала (1069 м²/г у ПУМ и 1030 м²/г у N-ПУМ), но также встроить 4.8 ат.% азота, половина из которого находилась в пиридиновой форме.

Никелевые катализаторы были синтезированы простым методом пропитки N-ПУМ раствором ацетата никеля с последующим отжигом при 350 °С. По данным различных физико-химических исследований, нанесение 4.9 масс.% Ni привело к формированию моноатомных центров никеля в окружении 1–2 атомов азота и 2–3 атомов кислорода. Увеличение содержания металла до 7.4 масс.% привело к преимущественному образованию суб-нанометровых частиц со средним размером 8.4 Å. Катализаторы показали активность в дегидрировании газообразной муравьиной кислоты при температурах 160–280 °С, продемонстрировав стабильное селективное получение H₂ до 99% при наивысшей исследуемой температуре в течение более 9 часов.

Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации в рамках государственного задания Института катализа им. Г.К. Борескова СО РАН и Института неорганической химии им. А.В. Николаева СО РАН.

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

[2] Bulushev D.A. et al. // J. Catal. 2021. V. 402. P. 264.

[3] Nishchakova A.D. et al. // Int. J. Hydrogen Energy. 2024. V. 68. P. 1080.

Моделирование и анализ физико-химических свойств заполненных одностенных углеродных нанотрубок на основе системы Те@УНТС.С. Петрова¹, Р.А. Эварестов², З.И. Попов¹, Д.Г. Квашнин¹¹Институт биохимической физики им. Н.М. Эмануэля РАН, ул. Косыгина 4,
Москва, Россия²Санкт-Петербургский государственный университет,
Университетская наб. 7-9, Санкт-Петербург, Россия
s.belim@yandex.ru**DOI: 10.26902/Graphene-25-087**

Исследование углеродных нанотрубок (УНТ) совершило значительный прорыв: от предположений о существовании нанотрубок, как новой формы углеродного соединения, до их практического использования в качестве транспорта материалов, или нано-реакторов [1–5]. А возможность управления свойствами нанотрубок позволяет оставаться им актуальными во многих областях. На данный момент одностенные УНТ представляют интерес для широкого спектра приложений: создание гибких электронных устройств, адресной доставки лекарств, создания композитных материалов и гетероструктур для сенсорики и катализа.

В данной работе рассматривается схожий с S и Se по своему стержневому строению Те, для которого исследования в области фотоники только начали проводиться. В ходе работы были исследованы структуры, где стержни Те помещались внутрь одностенных УНТ разного диаметра и хиральности. Расчеты проводились с использованием DFT в программном комплексе SIESTA с подобранными параметрами. Была проведена поэтапная оптимизации структуры Те@УНТ и отдельно УНТ и стержней Те. Рассчитаны энергии связывания между УНТ и стержнем, показавшая Ван-дер-Ваальсовое взаимодействие. Также были рассчитаны зависимости энергии от волнового вектора для всей структуры и отдельных компонент. Результаты показали изменение плотности электронного состояния при включении стержней теллура внутрь одностенных УНТ.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РНФ (грант № 25-73-20094, <https://rscf.ru/project/25-73-20094/>).

- [1] Shayeganfar F., Beheshtian J., Shahsavari R. // Langmuir. 2018.
- [2] Allard C., Alvarez L. *et al.* // Chem. Soc. Rev. 2024. V. 53. P. 8457.
- [3] Vorfolomeeva A.A., Okotrub A.V. *et al.* // J. Mater. Chem. A. 2025. V. 13. P. 4634.
- [4] Khlobystov A.N. // ACS Nano. 2011. V. 5. № 12. P. 9306.
- [5] Manishkumar D., Yadav H.M., Joshi H.M. *et al.* // Chem. Eng. Sci. 2023. V. 272. P. 18586.

**Гибкие проводящие пленки из композита на основе графена
для печатной электроники**

Н.В. Петякин¹, А.И. Иванов¹, И.В. Антонова^{1,2}

¹*Институт физики полупроводников им. А.В. Ржанова СО РАН,
просп. Акад. Лаврентьева 13, Новосибирск, Россия*

²*Новосибирский государственный технический университет,
просп. К. Маркса, 20, Новосибирск, Россия
npetyakin@isp.nsc.ru*

DOI: 10.26902/Graphene-25-088

В настоящее время наблюдается большой интерес к исследованиям, связанным с улучшением гибкости электронных устройств [1]. Одной из первоочередных задач для развития гибкой электроники является создание проводящего материала, обладающего высокой гибкостью. Возможность создания носимых электронных приборов накладывает дополнительные ограничения на используемые материалы, например, необходимость выдерживать деформации на уровне растяжимости кожи человека, которая может достигать до 20-40% в зависимости от участка тела. Большинство проводящих полимеров и композитов на их основе практически не растяжимы, что ограничивает возможность их применения в гибких системах. Однако использование в составе композита проводящего полимера PEDOT:PSS (PPSS) в комбинации с растягиваемыми полимерными добавками, такими как поливиниловый спирт (ПВС), позволяет значительно улучшить его механические характеристики.

В данной работе были исследованы электрические свойства композитных пленок на основе частиц графена и полимера PEDOT:PSS с добавлением ПВС при механических деформациях, возникающих в результате изгибов. Пленки толщиной ~350 нм были изготовлены с помощью 2D печати на подложках из полиэтилентерефталата (ПЭТ). Было продемонстрировано, что добавление 5 масс. % и более ПВС позволяет сохранить структурную целостность пленок при деформациях до 40% (радиус изгиба 0.13 мм). При этом значительно снижается рост сопротивления при таких деформациях (в ~3 раза) по сравнению с пленками без ПВС. Это вызвано образованием гибкого каркаса из ПВС внутри композитных пленок. Более того, было обнаружено, что данный каркас при добавлении не более 30 масс. % ПВС позволяет сохранить удельное сопротивление в пределах 20% от исходного композита без ПВС в составе (~250 Ом/□). Добавление ПВС также приводит к сохранению низкого уровня сопротивления при многократных значительных механических деформациях ($\varepsilon \approx 17\%$). Таким образом, композиты на основе графена с добавлением ПВС обеспечивают высокую проводимость.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант №25-19-20035).

[1] Corzo D., Tostado-Blázquez G., Baran D. // *Frontiers in Electronics*. 2020. V. 1. P. 594003

Влияние морфологии структуры на константы упругости двумерных материалов: атомистическое моделированиеП.В. Полякова¹, Д.С. Лисовенко², Ю.А. Баимова¹¹Институт проблем сверхпластичности металлов РАН, ул. Халтурина 39, Уфа, Россия²Институт проблем механики им. А.Ю. Ишлинского РАН,

просп. Вернадского 101, корп. 1, Москва, Россия

polina.polyakowa@yandex.ru**DOI: 10.26902/Graphene-25-089**

Благодаря своим уникальным свойствам, таким как высокая электро- и теплопроводность, большая прочность и гибкость, высокая химическая активность, графен имеет большое потенциальное применение во многих областях промышленности. Однако, его нулевая запрещенная зона ограничивает его использование в некоторых передовых технологиях, таких как наноэлектроника, нанооптика, наносенсоры и фотокатализ [1]. Поэтому поиск и экспериментальный синтез новых двумерных материалов, демонстрирующих широкую запрещенную зону, а также обладающих теплопроводностью и прочностью, сопоставимых с графеном, по-прежнему остается одним из наиболее привлекательных направлений исследований в области двумерных материалов. На сегодняшний день активно исследуются новые двумерные структуры, некоторые уже получены экспериментально, например, диаман, графин, борнитран.

Диаман/борнитран – это двумерные структуры с sp^3 -гибридизацией, состоящие из двух слоев графена/нитрида бора, связанных между собой ковалентной связью. Графин представляет собой монослой атомов углерода, которые имеют sp - и sp^2 -гибридизацию и особым образом уложены в решетке. Основное преимущество диаманов, графинов, борнитранов по сравнению с графеном, заключается в том, что они являются полупроводниками с широкой запрещенной зоной [2-4]. Электронные свойства материалов тесно связаны с механическими, поэтому вопросы, связанные с жесткостью и прочностью, приобретают важное значение.

В настоящей работе исследуются константы упругости двух морфологий диамана и борнитрана (АА и АВ) и пяти конфигураций графинов (α , β_1 , β_3 , γ_1 и γ_2). Методика расчета констант упругости двумерных материалов представлена в работе [5].

Установлено, что для диаманов и борнитранов морфология структуры не влияет на константы упругости. По сравнению с графеном/гексагональным нитридом бора диаман/борнитран обладают большим модулем Юнга, но меньшим коэффициентом Пуассона. Для графинов атомная конфигурация оказывает существенное влияние на значения констант упругости. Среди гексагональных графинов γ_1 -графин имеет наибольший модуль Юнга, а α -графин – наименьший. Показано, что среди ромбических графинов более высокая анизотропия наблюдается для β_3 -графина ($E_{max}/E_{min} = 2.65$, $G_{max}/G_{min} = 3.03$), чем для γ_2 -графина ($E_{max}/E_{min} = 2.24$, $G_{max}/G_{min} = 1.44$).

Работа Поляковой П.В. и Баимовой Ю.А. проводилась в рамках госзадания молодежной лаборатории ИПСМ РАН. Работа Лисовенко Д.С. проводилась в рамках государственной программы ИПМех РАН (проект № 124013000674-0).

- [1] Wu H.Q. *et al.* // Chin. Phys. B. 2013. V. 22. P. 098106.
- [2] Duhan N., Kumar T.D. // Appl. Surf. Sci. 2024. V. 642. P. 158553.
- [3] Hu Y. *et al.* // Nanotechnology. 2020. V. 31. P. 335711.
- [4] Barboza A.P.M. *et al.* // ACS Nano. 2018. V. 12. P. 5866.
- [5] Polyakova P.V. *et al.* // Comput. Mater. Sci. 2024. V. 244. P. 113171.

**Оценка сорбционного взаимодействия пиридина
с кислотными центрами оксида графена методом ИК-НПВО спектроскопии**

Д.-М.В. Ратова, Д.С. Чепрасова, И.В. Михеев

*Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова,
Ленинские горы 1, Москва, Россия*

dar Marrat@gmail.com

DOI: 10.26902/Graphene-25-090

Оксид графена (ОГ) — сложный слоистый, гетерогенный 2D материал на основе графена, на поверхности которого хаотично расположены кислородосодержащие функциональные группы (–ОН; –COOH, –O– и т.д.). Однако, в химии оксида графена остаются нерешенные вопросы: (1) полное описание структуры ОГ; (2) надежная идентификация функциональных групп и оценка их общей концентрации в материалах ОГ; (3) разработка методологии для определения кислородосодержащих групп и связанных с ними активных центров.

ИК-спектроскопия регулярно применяется, как метод для определения и идентификации кислородосодержащих групп. Несмотря на перспективность, относительную простоту и доступность метода, все еще остаются нерешенные вопросы в области аналитической химии оксида графена связанные с (1) надежной идентификацией полос в спектре, которая затруднена из-за перекрывания полос молекулярного спектра; (2) недостаточной чувствительностью определения кислородосодержащих групп; количество которых варьируется на уровне ммоль/г и ниже, что сопоставимо с теоретическим пределом обнаружения метода ИК; это, в свою очередь, приводит к необходимости использования методов химического усиления сигналов (*chemical signal amplification*).

Перспективным направлением для решения этой проблемы является метод спектрального зонда в ИК-спектроскопии. Метод, основывается на селективном взаимодействии молекулярного зонда (ИК-активная молекула) с активными центрами в исследуемом материале. Этот подход позволяет более детально изучить тонкую структуру спектра из-за появления характеристических признаков в спектре (смещение и/или образование новых полос в спектре). Ранее такой подход не применялся в области химии оксида графена.

Одним из таких зондов является пиридин, известная молекула в химии поверхности цеолитов, позволяющая селективно обнаружить кислотные активные центры Брэнстеда и Льюиса на поверхности твердых материалов.

В докладе будет: (1) показана возможность ИК-спектроскопического обнаружения кислотных центров Брэнстеда и Льюиса методом спектрального зонда (основная молекула пиридин и его d₅-изотополог); (2) показано оптимальное время экспозиции (ОГ-порошок) и (зонд-жидкий пиридин) для оценки времени достижения сорбционного равновесия молекул зонда с ОГ по двум аналитическим сигналам — масса, сорбированного зонда, и интегральная площадь характеристических полос ИК спектра; (3) показана стабильность аналитического сигнала по характеристическим полосам спектра с применением контрольных карт Шухарта.

Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ (грант № 24-73-10012).

Имитационное моделирование механических свойств композитных материалов с углеродными нанотрубкамиА.Е. Резванова¹, А.Н. Пономарев¹, Б.С. Кудряшов¹, М.И. Кочергин^{1,2}, В.Ю. Погудин^{1,2}¹*Институт физики прочности и материаловедения СО РАН,
просп. Академический 2/4, Томск, Россия*²*Томский государственный университет систем управления и радиоэлектроники,
просп. Ленина 40, Томск, Россия
ranast@ispms.ru***DOI: 10.26902/Graphene-25-091**

Гидроксипатит (ГА), являясь естественным компонентом зубной эмали, широко применяется в медицинской практике в качестве костно-замещающего материала. Низкие прочностные характеристики ГА ограничивают его использование в условиях высоких эксплуатационных нагрузок. Повышение механических свойств может быть достигнуто за счет добавления низкоразмерных материалов, таких как многостенные углеродные нанотрубки (МУНТ) [1,2], которые обладают высокой электро- и теплопроводностью и термической стабильностью. Использование МУНТ при создании гибридных композитов, сочетающих прочность углеродного волокна и биоактивную ГА матрицу, позволит создавать керамику с заданными физико-механическими характеристиками. При ограниченном наборе экспериментальных данных актуальной задачей является построение прогнозных моделей, способных с высокой точностью предсказывать механическое поведение материалов [3,4]. Целью настоящей работы является создание модели машинного обучения для прогнозирования микротвердости по Виккерсу композитной керамики на основе ГА в зависимости от концентрации углеродных нанотрубок. В качестве входных данных использовались 3 типа образцов, нагрузка индентирования и диагонали отпечатка индентора. Всего было 750 записей, разделённых на обучающую и тестовую выборки в соотношении 70:30. Для моделирования применялись линейная и полиномиальная регрессии, случайный лес решений, бустинг AdaBoost и искусственная нейронная сеть. Все модели оптимизировались с помощью сеточного поиска и оценивались по метрикам оценки качества моделей R^2 , MSE, MAE и MAPE. Наивысший показатель метрики машинного обучения получен с помощью нейронной сети ($R^2 = 0,959$), опередив полиномиальную регрессию ($R^2 = 0,939$), бустинг ($R^2 = 0,918$) и случайный лес решений ($R^2 = 0,909$). При минимальном значении MSE = 180,965 нейросеть лишь немного уступала полиному по MAE (7,825 против 6,464) и MAPE (2,989% против 2,5%), однако продемонстрировала более стабильное поведение и способность учитывать сложные нелинейные зависимости. Результаты подтверждают эффективность нейросетевых подходов в задачах моделирования свойств материалов и их потенциал для дальнейшего повышения точности прогнозирования.

Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ (грант № 25-23-00493)

[1] Deng C. *et al.* // Mater. Lett. 2007. V. 61. P. 1725.

[2] Zhao X. *et al.* // Ceram. Int. 2020. V. 46. P. 7903.

[3] Diao Y., Luchun Y., Gao K. // J. Mater. Sci. Technol. 2022. V. 109. P. 86.

[4] Zhang Y., Ling C. // npj Comput. Mater. 2018. V. 4. P. 25.

Влияние термической очистки в вакууме и аргоне на сенсорные свойства графенаД.В. Сорокин^{1,2}, Д.В. Смовж^{1,2}¹*Институт теплофизики имени С. С. Кутателадзе СО РАН,
просп. Акад. Лаврентьева 1, Новосибирск, Россия*²*Новосибирский государственный университет, ул. Пирогова 1, Новосибирск, Россия
d.sorokin@g.nsu.ru***DOI: 10.26902/Graphene-25-092**

Графен обладает уникальным сочетанием таких свойств, как высокая удельная площадь поверхности ($2630 \text{ м}^2/\text{г}$) и подвижность свободных носителей заряда ($250000 \text{ см}^2/(\text{Вс})$), гибкость и механическая прочность (модуль Юнга 1 ТПа), оптическая прозрачность в видимом диапазоне, делающих его идеальным материалом для газовых сенсоров и прозрачных носимых детектирующих устройств. Однако, функциональные свойства графеновых материалов будут меняться из-за адсорбции молекул в процессе создания устройств. Одним из популярных и дешёвых способов отчистки графена от атмосферных примесей является отжиг в инертной атмосфере (аргон, азот), вакууме или в восстановительной среде. Например, в экспериментах с CVD-графеном на медной подложке установлено, что экспозиция на воздухе сразу после синтеза приводит к изменению статического контактного угла от 60° до $85\text{--}90^\circ$ в течении 1 часа [1]. Авторами работы сделан вывод, что предварительная выдержка в кислородной среде графена не вносила вклад в динамику изменения контактного угла. Выдержка в атмосфере аргона с влажностью 100% напротив приводила к увеличению угла, указывая на ключевую роль адсорбции воды. Восстановление контактного угла графена на медной подложке к первоначальному значению, а, следовательно, и отчистка поверхности полностью достигалась с помощью отжига графена в водороде или аргоне.

Однако, из-за наличия медной подложки, препятствующей исследованию электрофизических свойств самого графена при выдержке в различных атмосферах и отжиге, контроль отчистки осуществлялся с помощью значения контактного угла смачиваемости. В данной работе проведена термическая очистка CVD-графена на кремниевой подложке в высоком вакууме (10^{-6} Торр) и в атмосфере аргона при температуре от 20 до 500°C с контролем электрического сопротивления. Исследована стабильность материала при последующей экспозиции в кислороде и влажной атмосфере, а также исследована динамика восстановления на воздухе свойств графена после отжига.

[1] Misyura S.Y. *et al.* // J. Mol. Liq. 2022. V. 349. P. 118116.

Тензорезистивные свойства полимерных композитов с углеродными наноматериалами при повышенных температурах

А.А. Федоров^{1,2}, Б.Ч. Холхоев³, В.Ф. Бурдуковский³, А.Ю. Ларичкин⁴, В.Е. Колодезев⁴, В.Л. Кузнецов⁵, С.И. Мосеенков⁵, В.А. Кузнецов^{1,2}

¹*Институт неорганической химии им. А.В. Николаева СО РАН,
просп. Акад. Лаврентьева, 3, Новосибирск, Россия*

²*Новосибирский государственный технический университет, просп. К. Маркса, 20,
Новосибирск, Россия*

³*Байкальский институт природопользования СО РАН,
ул. Сахьяновой, 6, Улан-Удэ, Россия*

⁴*Институт гидродинамики им. М.А. Лаврентьева СО РАН
просп. Акад. Лаврентьева, 15, Новосибирск, Россия*

⁵*Институт катализа им. Г.К. Борескова СО РАН
просп. Акад. Лаврентьева, 5, Новосибирск, Россия
andrew.fedorov.1999@mail.ru*

DOI: 10.26902/Graphene-25-093

Тензорезисторы широко применяются в лабораторных и промышленных масштабах для точного измерения перемещения, деформации и других механических величин. В настоящее время, перспективной задачей является создание тезочувствительных элементов на основе новых материалов, в частности для использования при повышенных температурах. Одними из таких материалов являются электропроводящие полимерные композиционные материалы (ПКМ). Для создания гибкого и теплостойкого ПКМ необходимо подбирать теплостойкие термопластичные полимерные матрицы. Однако, термопласты зачастую являются диэлектриками, поэтому для придания композитами достаточной электропроводности необходимо использовать электропроводящие нанонаполнители.

В рамках данного исследования были получены теплостойкие электропроводящие ПКМ на основе представителей семейств полибензимидазолов и ароматических полиамидов, а именно поли-2,2'-*n*-оксидифенилен-5,5'-добензимидазола (ОПБИ) и поли-*m*-фенилен-изофталамида (МПА) с одностенными и многостенными углеродными нанотрубками (ОУНТ и МУНТ). Содержание углеродных нанотрубок в композитах составило от 0,1 до 10 масс.%. Целью настоящей работы являлось установление взаимосвязи между морфологией полученных ПКМ, тензорезистивными свойствами при комнатной и повышенных температурах и типами использованных электропроводящих нанонаполнителей и полимерных матриц.

Исследование морфологии композитов показало, что МПА и ОПБИ взаимодействуют с нанотрубками в различной степени, и как результат разделяют их с разной эффективностью, лучшее разделение наблюдается в случае ОПБИ [1]. Это связано с более сильным взаимодействием макромолекул ОПБИ с поверхностью нанотрубок за счет π - π -стэкинга. По результатам динамического механического анализа были определены предельные температуры, при которых полимерные композиты на основе ОПБИ и МПА сохраняют свои механические свойства. Исследование тензорезистивных свойств показало, что в композитах с ОУНТ наблюдается гистерезис электросопротивления после снятия нагрузки, а в композитах с МУНТ отсутствуют гистерезисы электросопротивления, наблюдается линейный отклик при малых деформациях и коэффициент тензочувствительности не изменяется в диапазоне температур от комнатной до 250 °С.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 24-79-10223, <https://rscf.ru/project/24-79-10223/>.

[1] Kuznetsov V.A. et al. // J. Str. Chem. 2023. Vol. 64. № 7. P. 1212-1219.

Photonic two-dimensional nanostructures by catalyst-enhanced electrochemical lithography

Tuan-Hoang Tran*, Raul D. Rodriguez**, Pavel A. Bakholdin, Elizaveta Dogadina, Dmitry Cheshev, Evgeniya Sheremet

Tomsk Polytechnic University, Tomsk, Russia

*cungbinh9327@gmail.com

**raul@tpu.ru

DOI: 10.26902/Graphene-25-094

Graphite, the mother of graphene, is defined by its structural and optical uniformity and high chemical and temperature resistance. Here, we introduce a simple, single-step electrochemical method that allows for creating colorful radially symmetric photonic structures on highly oriented pyrolytic graphite (HOPG). The key to this transformation is a new concept we developed, termed Catalyst-Enhanced Electrochemical Lithography (CEEL), based on molybdenum disulfide (MoS_2) nanoflakes as an electrocatalyst to mediate the reaction. This process, driven by a localized electric field from a microwire electrode in a drop configuration, creates a radial gradient of graphene oxide (GO) as evidenced by Raman spectroscopy. The catalytic action of MoS_2 , reflected by intense gas evolution during the electrochemical oxidation reaction of HOPG, is critical for achieving the high optical quality of the final structure. The GO layer on HOPG with radially varying degree and depth of oxidation gives rise to the interfaces needed for the interference rings. The resulting GRIN (gradient-index) structures can be tuned by the voltage, reaction time, electrode-substrate distance, and catalyst concentration, allowing the generation of specific color palettes and ring spacings. We demonstrate the application of these photonic structures as a Surface-Enhanced Raman Spectroscopy (SERS) platform, which so far has been mainly reported on silicon but never before on carbon¹. The engineered gradient enables dual spectral and spatially-selective Raman signal amplification from deposited silver nanowires functionalized with a Raman probe, demonstrating functional control beyond conventional SERS substrates. This work establishes CEEL as a new tool in surface patterning, moving beyond complex instrumentation to a simple, catalyst-driven approach in the direct-write fabrication of integrated, all-carbon micro-optics, GRIN lenses, and advanced sensing platforms directly onto conductive substrates.

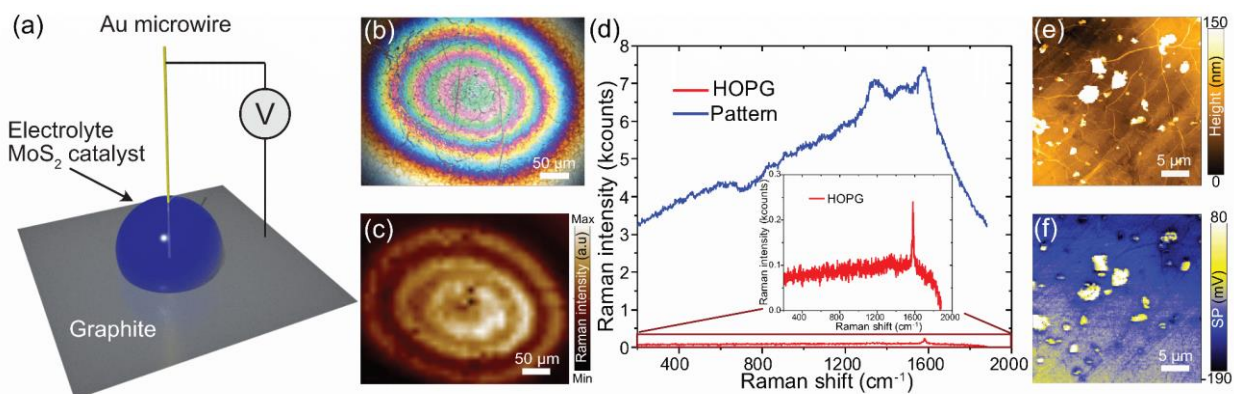


Figure 1. (a) Scheme of photonic nanostructure formation on HOPG, (b) optical image, (c) Raman map dominated by the luminescence background of the sample as shown in the (d) Raman spectra, (e) topography, and (f) surface potential (SP) of a photonic structure on HOPG.

This research was supported by the project Priority-2030-HIPI-053-198-2025.

[1] Dedelaite L. *et al.* // Sens. Actuators B Chem. 2020. V. 311. P. 127837.

Исследование влияния оксида графена на кинетику и чувствительность определения супероксид-аниона методом хемилюминесцентной спектроскопии

Г.Р. Чермашенцев, Н.С. Саратовский, С.Т. Овсеенко, М.А. Проскурнин, И.В. Михеев

Московский государственный университет им. М.В.Ломоносова,

Ленинские горы 1, Москва, Россия

chermashentsev96@mail.ru**DOI: 10.26902/Graphene-25-095**

Супероксид анион-радикал (САР) играет важную роль в регуляции биологических процессов, его избыток приводит к развитию окислительного стресса, повреждению клеток и формированию различных патологий. Оксид графена (ОГ) представляет собой углеродный наноматериал с уникальной двумерной структурой, насыщенной различными кислородсодержащими группами — потенциальными реакционными центрами. Особенно важным направлением является способность ОГ взаимодействовать с радикалами, в том числе с САР, что потенциально может оказывать влияние на точность их определения.

Короткое время жизни и низкая концентрация САР (в мкМ и нМ диапазоне) делают его определение крайне сложной задачей, требующей чувствительных, экспрессных и селективных методов анализа. Одним из наиболее подходящих методов является хемилюминесцентная (ХЛ) спектроскопия, позволяющая регистрировать интенсивность света, возникающего при реакциях супероксид анион-радикала с ХЛ-зондом, которые дают селективное свечение после реакции с радикалом.

Высокая реакционная способность САР требует его *in situ* получения. Два наиболее распространенных способа получения: (а) неселективный химический (каталитическое окисление пероксида водорода солями переходных металлов, например, Co(II), Rh(III)) и (б) селективный ферментативный (окисление ксантина до мочевиной кислоты ксантиноксидазой). Этот способ высокоселективен, но используемый фермент имеет высокую стоимость и требует ежедневной верификации ферментативной активности. Перспективным подходом к генерации САР является электрохимическое восстановление молекулярного кислорода на электроде в среде апротонного растворителя (ДМСО, ацетонитрил, и т.д.). Несмотря на важность САР как определяемого объекта, в работах не оценивались метрологические характеристики методик его определения и не валидировались методики его получения.

Цель работы — верифицировать подходы к генерации и определению САР с использованием ХЛ-спектроскопии и исследовать влияние ОГ на результат определения. Задачи включали оптимизацию условий получения аналитического сигнала для каждой модели генерации САР, оптимизацию условий электрохимического получения САР и оценку влияния ОГ различной степени диализной очистки (мембраны до 14 кДа) на результаты ХЛ-анализа.

В работе проведена оценка возможностей ХЛ спектроскопии для определения САР в присутствии ОГ. Исследованы химическая, ферментативная и электрохимическая модели генерации САР с использованием ХЛ-зондов люминола и люцигенина. Установлены метрологические характеристики: повторяемость, воспроизводимость и чувствительность в водных и неводных средах.

Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ (проект № 24-73-10012).

Улучшение физико-механических свойств эпоксидных адгезивных материалов за счет введения ОУНТ

С.П. Шадров, Х.А. Батт, Д.В. Красников, А.Г. Насибуллин

*Сколковский институт науки и технологии, Большой бульвар 30 стр.1, Москва, Россия
sergei.shadrov@skoltech.ru***DOI: 10.26902/Graphene-25-096**

Адгезивы на эпоксидной основе широко применяются во многих областях науки и техники. Ключевым требованием к таким материалам является обеспечение прочного соединения разнородных поверхностей. Существуют многочисленные подходы, направленные на улучшение физико-механических свойств эпоксидных адгезивов, и введение углеродных нанотрубок (УНТ) является одним из наиболее перспективных [1–3]. В существующих исследованиях обычно используются концентрации УНТ не ниже 0,1–0,25 масс. %, при этом для диспергирования применяют малоэффективные методы – ультразвуковая обработка или механическое перемешивание [4,5]. В связи с этим вопрос об улучшении физико-механических свойств эпоксидных адгезивов при использовании малого количества УНТ (менее 0,1 масс. %) остается открытым. В данной работе показано, как введение однослойных УНТ (ОУНТ) в количестве 0,005, 0,05, 0,1 и 0,25 масс. %, влияет на механические и электрические свойства эпоксидных адгезивов. Используя трехвалковую мельницу для получения модифицированного адгезива, было достигнуто равномерное распределение ОУНТ с размерами агломератов менее 5 мкм. Благодаря равномерному распределению ОУНТ даже при минимальной концентрации (0,005 масс. %) адгезионная и предельная прочность материала увеличивается на 45 % (с 20 до 29 МПа) и 30 % (с 17,5 до 23 МПа), соответственно, в то время как удельная электропроводность возрастает на $9 \cdot 10^3$ % (с 10^{-8} до 10^{-6} См/см). При повышении содержания ОУНТ до 0,25 масс. % наблюдается дальнейший рост характеристик: адгезионная прочность возрастает на 99% (40 МПа), предел прочности — на 64 % (29 МПа), а удельная электропроводность на 10^6 % (10^{-4} См/см) относительно немодифицированного адгезива. Таким образом было показано, что введение ОУНТ даже в количестве, соответствующем порогу перколяции ($\sim 0,005$ масс. %), в эпоксидную матрицу позволяет улучшить не только механические свойства, но и значительно повысить электропроводность. Одновременное улучшение множества характеристик является многообещающим для ряда применений, требующих высокой прочности соединения и электрических характеристик.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант № 22-13-00436 (П)).

- [1] Han G. *et al.* // Nano Mater. Sci. 2022. V. 4. P. 266.
- [2] Sam-Daliri O. *et al.* // Int. J. Adhes. Adhes. 2019. V. 88. P. 59.
- [3] Han S. *et al.* // Compos. Part A: Appl. Sci. Manuf. 2019. V. 120. P. 116.
- [4] Hu S. *et al.* // ACS Appl. Mater. Interfaces. 2022. V. 14. P. 7221.
- [5] Khun N.W., Troconis B.C.R., Frankel G.S. // Prog. Org. Coat. 2014. V. 77. P. 72.

**Молекулярно-динамическое моделирование CVD
синтеза графена на шероховатых подложках**

В.А. Андриященко¹, В.О. Рябов²

¹*Институт теплофизики им. С.С. Кутателадзе СО РАН,
просп. Акад. Лаврентьева 1, Новосибирск, Россия*

²*Новосибирский государственный университет, ул. Пирогова 1, Новосибирск, Россия
vladimir.andryushchenko@gmail.com*

DOI: 10.26902/Graphene-25-097

Контролируемый CVD-синтез высококачественного графена на металлических подложках остается ключевой задачей для его промышленного применения в гибкой электронике, композитных материалах, катализе и т.д. Однако, существующие технологии CVD-синтеза сталкиваются с проблемой неоднородности графеновых пленок из-за стохастического характера нуклеации. Промышленные медные фольги всегда обладают шероховатостью (0.1-2 нм), но ее влияние на синтез графена систематически не изучалось. Для управления процессом синтеза качественного графена на различных подложках необходимо глубокое понимание атомистических механизмов роста графена на реальных (неидеальных) подложках. Молекулярно-динамическое моделирование позволяет провести исследование данного процесса на атомарном уровне и приблизиться к достижению его понимания.

В работе проводится молекулярно-динамическое моделирование синтеза графена путем химического осаждения из газовой фазы на поверхностях меди с различной кристаллографической ориентацией зерен и контролируемой морфологией поверхности. Основной целью исследования является определение влияния морфологии поверхности на кинетику роста графена и его качество (наличие и тип дефектов). Морфология поверхности изменяется путем нанесения периодических текстур с заданными амплитудой и частотой. Для моделирования графена используется реакционный потенциал AIREBO [2]. Моделирование производится с помощью пакета LAMMPS. В процессе моделирования определяется кинетика роста графена при различных температурах и морфологиях подложки. Для анализа качества синтезированного графена используется радиальная функция распределения.

В результате моделирования установлена связь между шероховатостью и дефектностью синтезированного графена. Рост графенового покрытия осуществляется вдоль нанесенных на поверхность структур. Причем количество и ориентация дефектов существенно зависят от амплитуды и частоты заданных на поверхности текстур. Кроме того, установлено, что рост пленки начинается в углублениях, а не выступах текстур. Результаты сопоставлены с данными сканирующей электронной микроскопии графена с различной степенью покрытия шероховатых поверхностей. Степень покрытия варьировалась путем изменения времени синтеза графена. Наблюдается качественное согласование данных моделирования и эксперимента.

Результаты данного исследования могут быть использованы для оптимизации процессов синтеза графена, а также предсказания характера роста других 2D-материалов.

[1] Bae S. *et al.* //arXiv 0912.5485. 2009.

[2] Brenner D.W. *et al.* // JPCM. 2002. V. 14. N. 4. P. 783.

Моделирование сорбции водорода на низкоразмерных углеродосодержащих материалах: влияние атомноподобного базисаЕ.В. Аникина¹, Д.В. Бабайлова¹, В.П. Бескачко¹¹Южно-Уральский государственный университет, просп. Ленина 76, Челябинск, Россия
anikate@inbox.ru**DOI: 10.26902/Graphene-25-098**

Энергия связи водорода со структурой-основой – один из важнейших показателей при оценке эффективности материала для хранения водорода. Она может быть значительно переоценена при моделировании в базисе атомноподобных орбиталей из-за ошибки суперпозиции базисного набора, и для получения корректного значения в случае слабосвязанных систем необходимо учитывать поправку к этой ошибке [1]. Размер используемого базиса может сильно ускорить проведение численных экспериментов, но при этом не ясно, насколько уменьшение количества базисных функций повлияет на точность вычисления энергии связи. В данной работе на ряде углеродосодержащих монослоев (графен, нитрированный углерод C₂N, тетраоксо[8]циркулен) была смоделирована сорбция молекулярного водорода с использованием теории функционала электронной плотности.

Численные эксперименты с атомноподобными орбиталями проводились с использованием пакета SIESTA [2], где рассматривались базисы размера single- ζ (SZP) и double- ζ (DZP). Для каждого материала и размера базиса проводилась оптимизация согласно процедуре, описанной в работе [3]. Параметры моделирования подбирались таким образом, чтобы погрешность вычисления энергии связи водорода со структурой-основой не превышала 10 мэВ. Так как использовались периодические граничные условия, в направлении, перпендикулярном моделируемому монослою, размер ячейки брался достаточно большой (не менее ~40 Å), чтобы избежать взаимодействия структуры со своим изображением.

Полученные результаты показали, что для графена неожиданно хорошо сработал SZP базис при определении энергии связи водорода: отклонение от характеристик, вычисленных в DZP базисе, было минимальным. Для C₂N и тетраоксо[8]циркулена таких «радужных» результатов не получилось: даже после учета поправки к ошибке суперпозиции базисного набора энергии связи водорода могли отличаться от полученных в базисе DZP на ~30%. Таким образом, при моделировании слабосвязанных систем в пакете SIESTA базис по умолчанию и тем более базис небольшого размера (SZP) стоит использовать с большой осторожностью.

Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ (грант № 25-22-20023, <https://rscf.ru/project/25-22-20023/>).

[1] Alantev K.V. *et al.* // Bull. Russ. Acad. Sci.: Phys. 2023. V. 87. N. 11. P. 1667.

[2] Soler J.M. *et al.* // J. Phys. Condens. Matter. 2002. V. 14. N. 11. P. 2745.

[3] Anikina E.V., Beskachko V.P. // Bull. South Ural State Univ. Ser. “Mathematics. Mech. Physics.” 2020. V. 12. N. 1. P. 55.

Деформационное поведение силицена при одноосном растяженииА.Х. Ахунова, Ю.А. Баимова*Институт проблем сверхпластичности металлов РАН, ул. Халтурина 39, Уфа, Россия**akhunova.a.a@gmail.com***DOI: 10.26902/Graphene-25-099**

Двумерные материалы обладают прекрасными физическими, термическими и механическими свойствами, которые могут использоваться при разработке наноустройств в различных отраслях от биомедицины до аэрокосмической промышленности. Для обеспечения надежности таких устройств важно понимать, как двумерные материалы будут себя вести при различных механических нагрузках. При их синтезе неизбежно появление дефектов, которые могут сильно влиять на свойства материалов. Также, помимо естественно возникающих дефектов, перспективным является инженерия дефектов – намеренное создание дефектов для улучшения функциональных свойств материалов.

В данной работе методами молекулярной динамики исследовано влияние дефектов на деформационное поведение и механические свойства силиценовых листов при одноосном растяжении. Также проведено сравнение с графеном [1-3]. Особенностью данного исследования является то, что структура могла анизотропно изменяться в направлении, нормальном растяжению.

Моделирование одноосного растяжения в направлении кресло и зигзаг проводилось в программной среде LAMMPS. Взаимодействие между атомами углерода описывалось потенциалом AIREBO, между атомами кремния – потенциалом MEAM. Расчётная ячейка содержала 31000 атомов с геометрическими размерами 105×75 (графен) и 165×114 Å (силицен). Оси x и y ячеек были ориентированы в направлении кресла и зигзага, соответственно. Графен и силицен имеют гексагональную структуру, при этом графен – плоский, а силицен – гофрированный. Исследуемые дефекты представляли собой диполи, состоящие из двух дефектов 5-7, разделённых расстоянием l (плечом диполя). Было рассмотрено 6 дефектных структур, где цифры в названии диполя обозначают количество гексагонов между дефектами: ДД₀ ($l = 0$ Å); ДД₂ ($l = 6$ Å); ДД₄ ($l = 11$ Å); ДД₆ ($l = 15$ Å); ДД₈ ($l = 20$ Å); ДД₁₀ ($l = 25$ Å).

Установлено, что

- механических свойств силицена, такие как предел прочности, деформация разрушения и модуль упругости, монотонно снижаются с увеличением размера плеча диполя как при растяжении в направлении кресло, так и в направлении зигзаг;
- механизм деформации силицена при одноосном растяжении включает в себя как удлинение связей, ориентированных в направлении растяжения, так и поворот связей, близко ориентированных в этом направлении. Для обоих направлений растяжения связи подвергаются одновременному повороту и удлинению, в отличие от графена. При деформации графена в направлении кресло разрыв связей, происходит позже, чем в направлении зигзаг, т.к. в этом направлении прежде всего начинает действовать механизм удлинения связей, ориентированных в направлении кресло, и во-вторую очередь механизм поворота связей, ориентированных в направлении зигзаг. В то время как при растяжении в направлении зигзаг все связи подвергаются постоянному удлинению и повороту на всем этапе деформирования [2,3].

Исследование выполнено при финансовой поддержке госзадания ИПСМ РАН.

[1] Ахунова А.Х., Баимова Ю.А. // ЖТФ. 2023. Т. 93. № 4. С. 445.

[2] Akhunova A.Kh., Galiakhmetova L.Kh., Baimova J.A. // Appl. Sci. 2023. V. 13. № 1. P. 9.

[3] Akhunova A.Kh., Murzaev R.T., Baimova J.A. // Comput. Mater. Sci. 2024. V. 244. P. 113230.

Влияние морфологии углеродных нанотрубок на электрофизические свойства полиакриловых композитов для 3D-печати

К.И. Баскакова, А.М. Кондранова, О.В. Седельникова, Л.Г. Булушева, А.В. Окотруб

Институт неорганической химии им. А.В. Николаева РАН,

просп. Акад. Лаврентьева 3, Новосибирск, Россия

baskakova@niic.nsc.ru

DOI: 10.26902/Graphene-25-100

В работе исследованы электрофизические свойства композитов на основе акрилового фотополимера (АФП) и углеродных нанотрубок (УНТ) различной морфологии (однослойных и многослойных) для применения в пассивных оптических элементах в диапазоне 100–300 ГГц. Синтез многослойных УНТ (МУНТ) осуществляли методом химического осаждения из газовой фазы (CVD) с добавлением ацетонитрила, обеспечивающего азотдопирование. Однослойные УНТ (ОУНТ, TuBall™, OCSiAl) использовали без модификации. Для создания композитов УНТ предварительно диспергировали в изопропанол, смешивали с АФП и формировали периодические каркасы методом цифровой светодиодной проекции (ЦСП). Диэлектрические характеристики оценивали импедансометрией (1 кГц–7 МГц) и микроволновыми измерениями (500 МГц–4 ГГц), структурные свойства УНТ анализировали с помощью РЭМ, КРС-спектроскопии и энергодисперсионного анализа.

Установлено, что введение азота в МУНТ повышает их дефектность, но улучшает диспергирование в полимерной матрице и увеличивает электропроводность композитов. Порог перколяции для композитов с азотдопированными МУНТ снижен до 0,1% масс. по сравнению с 0,4% для немодифицированных МУНТ. Композиты с ОУНТ демонстрируют более высокую диэлектрическую проницаемость в низкочастотном диапазоне, тогда как азотдопированные МУНТ обеспечивают стабильность характеристик в СВЧ-диапазоне. Исследование 3D-печатных каркасов на основе композитов с азотдопированными МУНТ показало возможность настройки спектра пропускания в диапазоне 100–300 ГГц. Увеличение концентрации УНТ приводит к снижению интенсивности пропускания и сдвигу полос поглощения в сторону низких частот из-за релаксационных процессов в композите.

Слойность углеродных нанотрубок оказывает значительное влияние на электропроводность и диэлектрическую проницаемость полимерных композитов. ОУНТ демонстрируют более высокие значения проводимости и диэлектрической проницаемости по сравнению с МУНТ при одинаковой концентрации. Это связано с меньшим количеством дефектов структуры и большей площадью контакта с полимерной матрицей.

Диаметр углеродных нанотрубок играет ключевую роль в формировании проводящих сетей. Меньший диаметр УНТ способствует увеличению соотношения поверхности к объему, что усиливает взаимодействие с полимерной матрицей и повышает электропроводность. Длина углеродных нанотрубок существенно влияет на формирование перколяционных сетей и электропроводность композитов. Более длинные УНТ создают больше возможностей для межтрубчатого туннелирования, снижая общее сопротивление материала.

Полученные результаты подтверждают эффективность допирования МУНТ азотом для снижения порога перколяции и улучшения совместимости с полимерной матрицей. Полученные материалы перспективны для создания лёгких и гибких элементов экранирования, частотных фильтров и компонентов высокочастотной электроники.

Оптические и транспортные свойства графена в циркулярно поляризованном полеО.В. Кибис¹, М.В. Боев^{1,2}, И.В. Иорш^{1,2,3}, В.М. Ковалёв^{1,2}¹Новосибирский государственный технический университет,
просп. К. Маркса 20, Новосибирск, Россия²Институт физики полупроводников им. А.В. Ржанова СО РАН,
просп. Акад. Лаврентьева 13, Новосибирск, Россия³Department of Physics, Queen's University, 99 University Avenue, Kingston, Canada
boevm@isp.nsc.ru**DOI: 10.26902/Graphene-25-101**

Нерезонансное высокочастотное электромагнитное поле в настоящее время выступает в качестве инструмента, предоставляющего возможность управлять транспортными и оптическими свойствами разнообразных наноструктур. Ранее было показано, что циркулярно поляризованная электромагнитная волна (ЦЭВ) кардинальным образом меняет профиль отталкивающего потенциала в двумерных наноструктурах: вблизи максимума данного потенциала для электрона возникает область притяжения, и, таким образом, на отталкивающих примесных атомах и точечных дефектах формируются квазистационарные электронные состояния [1]. Теория ряда эффектов [2–4], построенная на основе упомянутой работы [1], применима для описания двумерных систем с параболическим законом дисперсии электронов и требует обобщения на случай материалов с линейным энергетическим спектром носителей заряда, в том числе графена.

В представляемой работе показано, что нерезонансная ЦЭВ модифицирует энергетический спектр электронов. Дисперсия электронов вблизи точки Дирака становится параболической, а между зонами открывается энергетическая щель. При этом эффективная масса электронов определяется характеристиками электромагнитной волны: она прямо пропорциональна напряженности электрического поля электромагнитной волны и обратно пропорциональна ее частоте. В результате, по сравнению с двумерными наноструктурами с исходно параболическим энергетическим спектром электронов, формирование квазистационарных состояний электронов на отталкивающих центрах в графене происходит при меньших интенсивностях нерезонансного поля, что значительно упрощает экспериментальное детектирование индуцированных квазистационарных состояний.

Настоящий доклад посвящен обсуждению трёх экспериментальных проявлений индуцированных квазистационарных состояний [5]. Во-первых, показано, что частотная зависимость поправки к удельному сопротивлению графена, обусловленная рассеянием электронов через квазистационарные состояния, носит резонансный характер и достигает 10 Ом при тысячекратном превышении числа электронов над числом короткодействующих отталкивающих примесных центров. Во-вторых, в рассматриваемой системе с индуцированными квазистационарными состояниями возможен эффект Кондо, характеристическая температура которого достигает нескольких кельвин при частоте ЦЭВ порядка ~мэВ и амплитуды колебаний напряженности электрического поля волны ~МВ/м. Наконец, разработанная теория предсказывает, что индуцированные квазистационарные состояния также доступны для прямых оптических исследований. Интерференция двух каналов поглощения электромагнитной волны (прямой межзонный переход и межзонный переход через квазистационарное состояние) делает форму резонанса коэффициента поглощения несимметричной, то есть индуцированные квазистационарные состояния обуславливают эффект Фано в графене, облучаемом нерезонансной высокочастотной ЦЭВ.

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

[2] Kibis O.V., Boev M.V., Kovalev V.M. // Phys. Rev. B. 2020. V. 102. P. 075412.

[3] Kibis O.V., Kolodny S.A., Iorsh I.V. // Opt. Lett. 2021. V. 45. P. 50.

[4] Iorsh I.V., Kibis O.V. // J. Phys.: Condens. Matter. 2021. V. 33. P. 495302.

[5] Kibis O.V. et al. // J. Phys.: Condens. Matter. 2025. V. 37. P. 035503.

Применение поликристаллических алмазных пленок для детектирования рентгеновского и оптического излучения

Д.В. Городецкий¹, О.В. Седельникова¹, Ю.В. Федосеева¹, А. М. Кондранова¹,
Е.В. Шляхова¹, А.В. Гусельников¹, А.В. Окотруб¹

¹ *Институт неорганической химии им. А.В. Николаева СО РАН,
просп. Акад. Лаврентьева 3, Новосибирск, Россия
gordim2005@yandex.ru*

DOI: 10.26902/Graphene-25-102

В работе проведено исследование возможности применения поликристаллических алмазных пленок для измерения интенсивности оптического и рентгеновского излучения. Синтез поликристаллических алмазных пленок проводился методом плазмохимического осаждения из газовой фазы в микроволновом плазменном реакторе пониженного давления «Astex». Активация плазмы осуществлялась микроволновым генератором с частотой 2.45 ГГц, мощностью 3 кВт и при давлении газовой среды ~110 мбар. В качестве основного плазмообразующего газа использовался водород, поступающий со скоростью 500 мл/мин. В качестве углеродного предшественника подавались насыщенные пары пентана (C₅H₁₂) при комнатной температуре, поток ~15 мл/мин. Синтезы алмазных пленок проводился на пластинах полированного кремния (100) размером 10x10 мм² и более и толщиной 0,45 мм. Для создания центров зародышеобразования алмазных кристаллов перед проведением синтеза на подложки наносилась дисперсия детонационных наноалмазов. После синтеза кремниевая подложка стравливалась в плавиковой кислоте. В результате были получены свободные поликристаллические алмазные пленки толщиной ~100 мкм. Для изготовления детекторов излучения и создания электропроводящих контактов проводилось локальное облучение фокусированным УФ лазером. Лазерная обработка приводит к формированию на поверхностных углубленных полосок из слоев sp² углерода с проводимостью ~ 30000 См/м.

На поверхности алмазной пленки были сформированы два электрода в форме встречных периодических полосок, соединенных общими токопроводящими шинами. Расстояние между полосками составляло 500 мкм, ширина токопроводящего канала составила 200 мкм, расстояние между противоположными электродами составило 500 мкм. Фотоэлектрические свойства детекторов определялись по изменению тока, протекающего между противоположными шинами через диэлектрический разрыв, при облучении видимым светом и рентгеновским излучением. Результаты демонстрируют перспективность использования алмазных пленок с графитизированными проводящими электродами в качестве детекторов мягкого рентгеновского и оптического излучения.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ (№ 22-72-10097-П)

**Влияние морфологических особенностей углеродных наноструктур на их
эффективность в гипертермических приложениях**

О.А. Гурова, Е.В. Шляхова, А.В. Окотруб

*Институт неорганической химии им. А.В. Николаева СО РАН,
просп. Акад. Лаврентьева, 3, Новосибирск, Россия*

gurova@niic.nsc.ru

DOI: 10.26902/Graphene-25-103

Углеродные наноструктуры (УНС) обладают широким спектром преимуществ для биомедицинских применений. УНС используются в доставке лекарств, заживлении ран, биосенсорике и современных методах лечения рака, включая гипертермию. Они способны эффективно поглощать и преобразовывать инфракрасное излучение в тепло, необходимое для локального разогрева тканей и органов [1].

В данной работе использовались несколько 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 ОУНТ прокаливались при 500°C в муфельной печи на открытом воздухе. Удаление каталитического железа производилось с помощью комбинированного метода очистки с использованием соляной кислоты и магнитной сепарации [2]. ОУНТ были заполнены неорганическими веществами с помощью ампульного метода. Для придания гидрофильных свойств исходные УНС были окислены, а заполненные ОУНТ были диспергированы с поверхностно-активным веществом.

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 дисперсий всех образцов в воде и физиологическом растворе.

Внедрение углеродных наноматериалов в биологические ткани было исследовано на личинках дрозофилы особей генотипа *hs-Gal4; UAS-GFP.nls* [3]. 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).

[1] Deb P.K. *et al.* // *Biomaterials and Bionanotechnology*. Elsevier. 2019. P. 375–413

[2] Gurova O.A. *et al.* // *Phys. Status Solidi B*. 2019. P. 1800742

[3] Gurova O.A. // *Phys. Status Solidi B*. 2018. P. 1700264.

Муаровые диаманы: DFT моделирование**В.А. Демин, Д.Г. Квашнин, Л.А. Чернозатонский***Институт биохимической физики им. Н.М. Эмануэля РАН,**ул. Косыгина 4, Москва, Россия**victordemin88@gmail.com***DOI: 10.26902/Graphene-25-104**

Муаровые диаманы $Dn\theta$ – алмазоподобные структуры, основой которых являются биграфены, слои которых повернуты друг относительно друга на угол θ [1]. Образование межслоевых связей происходит при приложении давления, а стабилизация структуры осуществляется за счет адсорбции легких атомов на поверхности бислоя.

В данной работе приведены результаты DFT моделирования муаровых Янус-диаманов, верхний слой которых покрыт атомами водорода, а нижний – атомами фтора (Рис.1а). Расчеты показали стабильность таких структур: энергия в расчете на атом ниже, чем у графена и сравнима с энергией графана, а фононный спектр не содержит мнимых частот (Рис.1б).

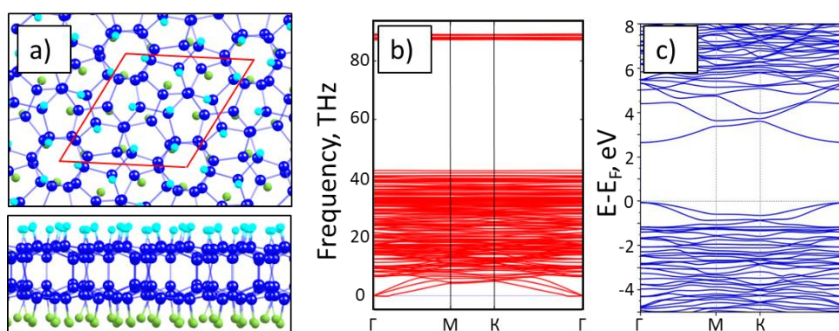


Рис. 1. Структура диамана HF-Dn21, его фононный спектр и электронная зонная структура.

Межслоевое связывание и адсорбция атомов на поверхности слоев приводят к изменению гибридизации атомов углерода с sp^2 на sp^3 , разрушению π -системы графена и, следовательно, появлению запрещенной зоны $E_g=2.7$ эВ (Рис.1с). Наличие широкой запрещенной зоны влияет на оптические свойства. Рассмотренные диаманы являются прозрачными для видимого света, но обладают замечательными коэффициентами поглощения в УФ-области.

Свойства муарового Янус-диамана отличаются от свойств полностью гидрированных или фторированных диаманов. Таким образом, изменяя атмосферу, в которой происходит синтез диаманов, возможна тонкая настройка электронных и оптических свойств получаемых структур.

Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ (грант №24-22-00444).

[1] Chernozatonskii, L. A., Demin, V. A., Kvashnin, D. G //C. 2021. V.7. №17.

**Сложнонапряженное состояние нанопластинок графита
между слоями пекового кокса**

А.В. Дмитриев

*Челябинский государственный университет,
ул. Братьев Кошириных 129, Челябинск, Россия*

avdm@ya.ru

DOI: 10.26902/Graphene-25-105

Для изготовления компактного слоистого материала использовали самопроизвольное распределение каменноугольного пека (92%) по поверхности стенок сот терморасширенного графита [1]. Каменноугольный пек отвердили окислением кислородом воздуха при нагреве до 250°C. Из подготовленной шихты после размола прессовали заготовки. Давление прессования в глухой матрице вытеснило воздух из материала заготовок. Окисленный пек сохранил пластичность и способность спекаться при коксовании. Термообработку заготовок, включая обжиг и графитацию, проводили в условиях электродного производства. Кристаллическую структуру и физико-механические свойства заготовок характеризовали стандартными методами. Результаты исследований приведены в табл. 1.

Табл. 1. Результаты физико-механических и рентгеноструктурных исследований

Материал заготовок	d_k , г/см ³	$\sigma_{сж}$, МПа	d_{002} , нм		L_c , нм	
			Кокс	Графит	Кокс	Графит
Спрессованный	1.2	-	0.374	0.3364	0.15	5.33
Обожженный	1.52	130	0.3655	0.3373	0.21	2.38
Графитированный	1.65	75	0.349	0.3405	0.77	2.43

После обжига наблюдается увеличение межслоевого расстояния и снижение размера блоков мозаики L_c в два раза. После графитации межслоевое расстояние увеличивается более значительно, но снижение размеров блоков мозаики незначительно. Кристаллическая структура фазы пекового кокса соответствует неграфитируемому материалу, см. табл. 1. Кокс имеет глобульную структуру из искривленных плоскостей графита, и механические нагрузки могут изменять форму глобул. Для монокристалла графита усадки при термической обработке приводят к снижению L_c и к увеличению d_{002} . Наибольшая усадка происходит при обжиге заготовок, и вызывает снижение L_c в два раза. После графитации это снижение сохраняется. Температурные усадки при охлаждении наибольшие у графита перпендикулярно слоям, и приводят к растяжению d_{002} при охлаждении. При выдержке в ходе графитации под действием высокой температуры механические нагрузки релаксируют. Величина изменения межслоевого расстояния у нанопластинок графита соответствует предельному давлению смятия фазы пекового кокса. Смятие выравнивает напряжения растяжения перпендикулярно плоскостям в нанопластинках графита по объему заготовок. Искусственные графиты имеют трещины температурного расширения кристалликов в составе компактного материала. При растрескивании сохраняются растягивающие напряжения от усадки кристаллитов в перпендикулярном слоям направлении увеличивают межплоскостное расстояние. Это снижает степень графитации при определении степени графитации по межплоскостному расстоянию. Остаточная дефектность после обжига и после графитации позволяет получать смятие нанопластинок графита между слоями пекового кокса без образования волн и ряби на поверхности.

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

Электронные свойства гетероструктурных нанотрубок CrI_3 @CNT и CrCl_3 @CNT

А.Н. Еняшин

*Институт химии твердого тела УрО РАН, ул. Первомайская, 91, Екатеринбург, Россия
enyashin@ihim.uran.ru***DOI: 10.26902/Graphene-25-106**

Открытие первого двумерного ферромагнетика - монослоя CrI_3 – стимулировало поиск и синтез возможных одномерных ферромагнетиков. Методом капиллярного наполнения углеродных нанотрубок CNT были получены их эндоедральные композиты с нанотрубками и нанокристаллитами CrI_3 или CrCl_3 (CrI_3 @CNT [1] или CrCl_3 @CNT [2]).

В данной работе с использованием метода функционала электронной плотности (DFT) представлены предварительные сведения о стабильности, электронной структуре и типе магнитного упорядочения изолированных однослойных нанотрубок CrI_3 и CrCl_3 и ряда гетероструктурных нанотрубок CrI_3 @CNT и CrCl_3 @CNT.

Установлено, что нанотрубки CrI_3 и CrCl_3 становятся более стабильными, чем соответствующие наноленты с оборванными связями при радиусах $>14 \text{ \AA}$ и $>10 \text{ \AA}$, соответственно. Как и родительские кристаллические фазы, все изученные нанотрубки являются полупроводниками, где верхняя валентная зона состоит из смеси $\text{I}5p$ -($\text{Cl}3p$ -) и $\text{Cr}3d$ -состояний, а нижняя зона проводимости состоит из $\text{Cr}3d$ -состояний. Величина запрещенной щели нанотрубок уменьшается при уменьшении радиуса. Исследование подтвердило сохранение ферромагнитного упорядочения в нанотрубках вне зависимости от их хиральности, причём его относительная энергия становится практически такой же, как у монослоёв уже при радиусах $>16 \text{ \AA}$.

Зонные структуры CrI_3 @CNT демонстрируют незначительную гибридизацию состояний разных компонентов, при этом перенос заряда от CNT к CrI_3 оказался несущественным независимо от типа обоих компонентов. CrI_3 @CNT на основе металлической CNT остаётся металлом, а гетероструктура CrI_3 @CNT на основе полупроводниковой CNT характеризуется как гетеропереход II типа (ступенчатый) с запрещенной зоной 0-0,08 эВ, где нижний и верхний края щели являются соответственно валентной зоной углерода и зоной проводимости CrI_3 . Напротив, в гетероструктурах CrI_3 @CNT наблюдается перенос заряда от CNT к CrI_3 , а их зонные структуры соответствуют гетеропереходам III типа (разрывным).

Несмотря на возможное перераспределение электронной плотности или возможный перенос заряда при контакте галогенидов хрома и углерода, расчёты подтверждают сохранение ферромагнитного состояния для CrI_3 и CrCl_3 во всех рассмотренных гетероструктурах CrI_3 @CNT и CrCl_3 @CNT. При этом, в большинстве изученных гетероструктур CrI_3 @CNT наблюдалось ослабление ферромагнитного упорядочения в CrI_3 (на 2-25%).

Исследование выполнено в рамках бюджетной темы ИХТТ УрО РАН № 124020600024-5.

[1] Çaha I. *et al.* // Commun. Chem. 2025. V. 8. P. 155.

[2] ul Ahmad A. *et al.* // 2025. (in preparation)

Неидеальный транспорт в гетеропереходе одностенные углеродные нанотрубки/кремний

Е.А. Дрони́на, Н.Г. Ковальчук, А.Л. Данилюк, С.Л. Прищепа
Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники,
ул. П. Бровки 6, Минск, Беларусь
n.kovalchuk@bsuir.by

DOI: 10.26902/Graphene-25-107

Исследовались вольт-амперные характеристики (ВАХ) гетеропереходов одностенные углеродные нанотрубки/кремний (ОСУНТ/Si). Образцы формировались нанесением пленки ОСУНТ на кремниевые подложки методом химического парофазного осаждения и характеризовались методами спектроскопии комбинационного рассеяния, сканирующей электронной микроскопии, ИК спектроскопии [1]. Измерения ВАХ проводились в широком диапазоне температур, от комнатной до 20К. Из анализа прямых ветвей ВАХ в рамках термоэлектронного подхода [2] извлекались такие параметры гетероперехода, как величина барьера и коэффициент неидеальности. Было получено, что при комнатной температуре коэффициент неидеальности равнялся 1,8 эВ, а барьер составлял 0,36 эВ. Эти параметры являются типичными для подобного рода гетеропереходов. С понижением температуры величина барьера снижалась, а коэффициент неидеальности увеличивался, нелинейно завися от температуры. При 20К барьер составлял 0,03 эВ, а коэффициент неидеальности достигал значения 42. Подобное поведение параметров указывает на неидеальный транспорт носителей заряда через барьер, вызванный пространственными неоднородностями.

Для корректного описания свойств гетероперехода использовался статистический метод Вернера-Гюттлера [3] с разбиением всего температурного диапазона на три участка: 20–40К, 40К–80К и 90К–315К. В результате были получены средние значения барьера, стандартные отклонения и эффективная константа Ричардсона для каждого из температурных диапазонов. Вместе с тем, при криогенных температурах нельзя исключать влияние других, нежели термоэлектронная эмиссия, механизмов переноса заряда через барьер. В работе анализируются такие механизмы, как туннелирование, генерация и рекомбинация носителей заряда на интерфейсе, рассеяние на оптических фононах. Все это вызывает аномально низкое значение эффективной константы Ричардсона при низких температурах.

Работа выполнена при финансовой поддержке БРФФИ (грант № Ф25МЭ-016)

[1] Dronina L.A. *et al.* // Appl. Nanosci. 2025. V. 15. № 2.

[2] Зи С. Физика полупроводниковых приборов. М.: Мир, 1984. 456 с.

[3] Werner J.H., Güttler H.H. // J. Appl. Phys. 1991. V. 69. P. 1522.

Сенсорные свойства тонких пленок дисульфида вольфрама

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

Институт неорганической химии им. А.В. Николаева СО РАН,

просп. Акад. Лаврентьева, 3, Новосибирск, Россия

x-rayspectroscopy@mail.ru

DOI: 10.26902/Graphene-25-108

Диоксид азота (NO_2) – один из основных загрязнителей воздуха, выбрасываемых в атмосферу при сжигании различных видов топлива во время работы промышленных предприятий и транспортных средств [1]. Разработка высокоэффективных газовых сенсоров, работающих в нормальных условиях (при комнатной температуре и влажности 40-70%) для его раннего определения является актуальной задачей. Химрезистивные газовые сенсоры являются самым простым, недорогим и легко интегрируемым типом сенсорного элемента с рядом преимуществ, таких как малые габаритные размеры, простота конструкции и изготовления. 2D полупроводники с высоким отношением поверхности к объему и стабильностью в различных химических средах перспективны для сенсорных приложений [2]. Дисульфид вольфрама (WS_2) принадлежит к семейству 2D слоистых соединений и состоит из плоскости атомов вольфрама, зажатой между двумя плоскостями атомов серы, что создает различные адсорбционные места. Кроме того, электропроводность WS_2 очень чувствительна к переносу заряда [3], что делает его перспективным материалом для химрезистивных сенсоров.

Метод химического осаждения из газовой фазы (CVD) позволяет получить тонкие пленки наноразмерных материалов. В данной работе исследовались сенсорные элементы, полученные сульфированием слоев вольфрама наноразмерной толщины методом CVD. Наноразмерные слои вольфрама получали магнетронным распылением W в течение времени $t = 10-90$ с на Si/SiO_2 -подложку, тем самым регулировали толщину напыления W (соответствующие образцы обозначены как WS_2-t). Образец WS_2-20 с имел поверхность с плотно упакованными горизонтальными наночастицами. Сульфидирование более толстых слоев W дает пленки, состоящие из вертикальных и горизонтальных наночастиц WS_2 .

В данной работе было изучено влияние толщины напыленного вольфрама и морфологии поверхности на сенсорный отклик. Наибольший отклик на диоксид азота при комнатной температуре демонстрирует пленка WS_2-30 с. Повышенная чувствительность объясняется высоким отношением поверхности к объему, обеспечиваемым горизонтальной и вертикальной ориентацией малых наночастиц WS_2 . Чувствительность WS_2-30 с составляет к NO_2 6,4%/ppm при комнатной температуре и 12%/ppm при 125°C. Предел обнаружения NO_2 (LOD), рассчитанный для лучшего датчика WS_2-30 с, составляет 15 ppb при комнатной температуре и 8 ppb при 125 °C, что является наименьшим по сравнению литературными данными для других WS_2 сенсоров. Датчик также работает во влажной среде и значительно менее чувствителен к NH_3 и смеси газов H_2 , CO и CO_2 .

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

[1] Victorin K. // Mutat. Res. 1994. V. 317. P. 43.

[2] Wu R., Hao J., Wang Y. // Small 2024. V. 20. P. 2404821

[3] Sanyal G., Vaidyanathan A., Rout C.S., Chakraborty B. // Mater. Today Commun. 2021. V. 28. P. 102717.

**Композиты на основе МУНТ и продуктов пиролиза
целлюлозы для электродов суперконденсаторов**

К.М. Попов, В.И. Сысоев, А.В. Окотруб

*Институт неорганической химии им. А.В. Николаева СО РАН,
просп. Акад. Лаврентьева, 3, Новосибирск, Россия
popov@niic.nsc.ru*

DOI: 10.26902/Graphene-25-109

Проведена разработка углеродного композиционного материала для электродов суперконденсаторов. Методика получения композитов на основе многослойных углеродных нанотрубок (МУНТ) и целлюлозы включала в себя кислотную обработку компонентов, их химическую сшивку и отжиг материала в инертной атмосфере. Многослойные углеродные нанотрубки повышают электропроводность композита, тогда как термически обработанная целлюлоза может увеличивать удельную площадь поверхности композита.

Процесс создания композиционного материала начинается с функционализации МУНТ в смеси серной и азотной кислот [1], приводящей к формированию гидрофильных групп (-COOH, -OH), что улучшает диспергируемость МУНТ в воде. Модифицированные компоненты смешивают в водной среде, подвергают ультразвуковой обработке для достижения равномерного распределения, после чего суспензию фильтруют под вакуумом, формируя композит целлюлоза/МУНТ. Электрохимические характеристики композитов продуктов пиролиза целлюлозы и МУНТ исследовались методом циклической вольтамперометрии в трёхэлектродной ячейке.

Исследовано влияние температуры обработки и соотношения компонентов в композитах на их электрохимические характеристики в трёх типах электролитов: 6М КОН, 1М ацетонитрильный раствор NaClO₄ и 1-этил-3-метилимидазолия тетрафторборате (EMIBF₄). Наибольшая удельная ёмкость композиционного материала, ~62 Ф/г, достигнута при плотности тока 0,2 А/г достигнута в 6М КОН. В электролитах на основе NaClO₄ и EMIBF₄ наибольшие электрохимические показатели продемонстрировали плёнки из функционализированных нанотрубок (~20 Ф/г при 0,2 А/г).

Исследованы ключевые электрохимические параметры (удельная мощность, ёмкость и стабильность) прототипов суперконденсаторов в двухэлектродной конфигурации с электродами на основе композиционных углеродных материалов. Практические испытания прототипов суперконденсаторов с использованием водных и органических электролитов в электрической цепи с красным светодиодом выявили, что суперконденсаторы собранные в корпусе CR2032, с электродами из функционализированных нанотрубок общим весом 23,8 мг, используя EMIBF₄ в качестве электролита обеспечивают непрерывную работу в течение 150 секунд при токе разряда ~1,7 мА.

[1] Popov K.M. *et al.* // Phys. Status Solidi B 2016. V. 253. N. 12. P. 2406.

Фотохимия N_2O_4 , CH_3CN и CCl_4 в межслоевом пространстве фторированного графита под действием фотонного излученияГ.И. Семушкина¹, Ю.В. Федосеева¹, А.А., Макарова², А.В. Окотруб¹, Л.Г. Булушева¹¹Институт неорганической химии им. А.В. Николаева СО РАН,

просп. Акад. Лаврентьева, 3, Новосибирск, Россия

²ICB, FUB, Берлин, Германияsemushkina.g@niic.nsc.ru**DOI: 10.26902/Graphene-25-110**

Фторированный графит (ФГ) - слоистый материал, состоящий из чередующихся слоев фторированного графена, слабо взаимодействующих между собой за счет сил ван-дер-Ваальса. Фторирование графита неорганическими фторидами при комнатной температуре дает соединения CF_x ($0.05 \leq x \leq 0.5$), где регулировка x позволяет управлять межслоевым расстоянием, создавая адаптивную матрицу для внедрения различных молекул. Матрица частично фторированного графита демонстрирует высокую термическую и гидролитическую стабильность, выступая в качестве нанореактора для химических превращений и одновременно служит стабилизирующей средой для энергоемких и лабильных соединений. Фотоактивация внедренных соединений в матрице ФГ приводит к генерации активных частиц в межслоевом пространстве ФГ и направленной функционализации ФГ матрицы. В связи с этим ФГ сочетает в себе свойства устойчивой матрицы и активного функционального материала, что делает его крайне интересным материалом в разработке каталитических систем, носителей для хранения и разделения веществ, а также материалов для фотохимии.

Целью данной работы является исследование фотоиндуцированных изменений во фторированном графите с внедренными молекулами ацетонитрила, тетраоксид диазота и четыреххлористого углерода под действием белого пучка синхротронного излучения, а также УФ-излучения. Изменения в структуре и составе фторированного графита и инкапсулированных молекул-гостей были изучены до и после облучения с использованием рентгеноструктурного анализа, ИК-спектроскопии, рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии и околопороговой тонкой структуры рентгеновского спектра поглощения (NEXAFS) в сопоставлении с расчетами методом теории функционала плотности.

В этой работе мы провели всесторонний анализ функционального состава, электронной структуры и стабильности фторированных графитовых матриц одинакового состава, а также фотохимической активности внедренных CH_3CN , N_2O_4 и CCl_4 до и после воздействия синхротронного пучка нулевого порядка продолжительностью до 420 секунд и после УФ-излучения ($\lambda=400\text{nm}$) в течение часа. Было обнаружено, что молекулы гостя способствуют фотоиндуцированной деградации матрицы ФГ под воздействием белого пучка, а именно ее частичному дефторированию, образованию вакансий и легированию азотом для систем с внедренным CH_3CN и N_2O_4 , а также хлором для CCl_4 . УФ-облучение инициирует полную деинтеркаляцию CH_3CN и CCl_4 из межслоевого пространства ФГ. Примечательно, что только в системе $CCl_4@CF$ этот процесс приводит к значительному дефторированию матрицы ФГ.

Автор выражает благодарность Сибирскому суперкомпьютерному центру Сибирского отделения Российской академии наук за предоставленные вычислительные ресурсы для проведения численных экспериментов. (<http://www.sccc.icmmg.nsc.ru>).

Антимикробные свойства электронного текстиля, созданного с применением оксида графена и наночастиц серебра

А.А. Алексеев, Ф. Д. Васильева, З.И. Евсеев, С.А. Смагулова
Северо-Восточный федеральный университет им. М.К. Аммосова,
ул. Белинского 58, Якутск, Россия
smagulova@mail.ru

DOI: 10.26902/Graphene-25-111

В настоящее время существует огромное количество инфекционных заболеваний, вызванных различными микробами. Чрезмерное использование антибиотиков в медицине привело к тому, что многие микробы приобрели устойчивость к ранее эффективным препаратам в результате мутаций. Для решения этой проблемы проводится поиск новых антимикробных материалов, обладающих иными механизмами действия, к которым не возникает резистентности у микробов.

В качестве новых антимикробных материалов наиболее перспективными являются оксид графена, наночастицы серебра (AgNP) и нанокompозиты (AgNP/ОГ), и данная работа посвящена исследованию антимикробных свойств этих материалов. Показано, что в суспензии основным механизмом уничтожения бактерий является разрезание стенок бактерий острыми краями чешуек оксида графена. Слабо окисленный графен с содержанием атомов кислорода 20% и с маленькими латеральными размерами ~ 0,1 мкм, обладает более эффективными антибактериальными свойствами, что объясняется тем, что после разрезания стенок бактерий они проникают внутрь бактерий, где вызывают окислительный стресс, способствующий гибели бактерий. В текстили происходит облепление поверхностей оксида графена бактериями, что приводит окислительному стрессу мембран бактерий за счет переноса электронов от бактерий к чешуйкам оксида графена. Показано, что в суспензии и в текстили нанокompозиты AgNP/ОГ обладают наибольшими антибактериальными и фунгицидными свойствами. Полученные результаты могут иметь значение для создания антимикробных медицинских бинтов и пластырей на основе электронного текстиля.

Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ (грант № 24-22-20035).

Теоретическое моделирование адсорбции водорода на BNOC наноматериалах с дефектами кислорода и углерода

Л.Ю. Сорокина, Л.А. Варламова, П.Б. Сорокин

Национальный исследовательский технологический университет «МИСиС»,

Ленинский пр. 4 стр. 1, Москва, Россия

l.sorokina@misis.ru

DOI: 10.26902/Graphene-25-112

В работе проведено комплексное исследование водородной адсорбции на наноматериалах BNOC, содержащих дефекты кислорода и углерода, с использованием как экспериментальных методов, так и теоретического моделирования. Особое внимание уделено влиянию структурных дефектов на водородную ёмкость. Теоретические расчёты, выполненные методом функционала плотности (DFT), показали, что способность BNOC к адсорбции водорода зависит от типа и характера дефектов в решётке. Чистый h-BN и структуры с «армчер»-границами BN/C стабильно удерживают до 2,3 мас.% H₂ при температуре 77 К, тогда как «зигзаг»-границы обеспечивают более высокую адсорбцию (до 4,0 мас.%) лишь при температурах ниже 70 К.

Наиболее перспективными оказались кислородные дефекты: один такой дефект способен удерживать до десяти молекул водорода благодаря выраженному локальному дипольному взаимодействию. При температуре 77 К водородная адсорбция на таких участках достигает 5,3 мас.% и остаётся термодинамически устойчивой, тогда как при дальнейшем увеличении концентрации происходит десорбция. Полученные данные хорошо согласуются с экспериментальными результатами и подтверждают ключевую роль дефектной инженерии в повышении водородной ёмкости BNOC. Таким образом, водородная активация BNOC материалов приводит к формированию активных центров, что делает их перспективными кандидатами для твердотельного хранения водорода при криогенных температурах.

Модификация поверхности алмазной пленки с графитовыми электродами и исследование фотоотклика на рентгеновское излучение**Ю.В. Федосеева, Д.В. Городецкий, А.Д. Федоренко,****А.В. Окотруб, Л.Г. Булушева, О.В. Седельникова***Институт неорганической химии им. А.В. Николаева СО РАН,**просп. Акад. Лаврентьева 3, Новосибирск, Россия**fedoseeva@niic.nsc.ru***DOI: 10.26902/Graphene-25-113**

Разработка микродатчиков на рентгеновское излучение имеет важное значение в промышленности, медицине, развитии космоса, экологии. Алмаз характеризуется оптической прозрачностью в широком оптическом диапазоне и обладают чрезвычайно высоким сопротивлением и стабильностью. Поликристаллические алмазные пленки были получены в лабораторных условиях методом плазмо-стимулированного CVD синтеза при активации микроволновым разрядом из водорода и пентана. Продемонстрирована возможность изготовления на их основе датчиков рентгеновского излучения путем нанесения встречных параллельных графитовых электродов трапецевидного сечения в результате облучения поверхности алмазной пленки ультрафиолетовым лазером на воздухе. Анализ морфологии, состава и структуры проводились методами растровой электронной микроскопии, рамановской спектроскопии и рентгеноэлектронной спектроскопии. Воздействие лазерным излучением трансформирует поверхность алмаза с образованием дефектного окисленного графитоподобного слоя. Дополнительная модификация поверхности датчиков проводилась в результате нагрева в кварцевом реакторе в потоке газообразного аммиака при температуре 600 °С в течение 30 мин или в потоке разбавленного аргоном водорода (10%) при температуре 400 °С в течение 10 мин. Поверхностная концентрация кислорода в графитовых треках составляет 22 ат%, а азота – 11 ат%. После отжига в потоке аммиака трапецевидные углубления графитовых треков стали иметь более четкую форму, а поверхность близлежащих кристаллитов алмаза очистилась от аморфных углеродных частиц – продуктов травления алмаза. Углеродная компонента в отожженном датчике имеет более упорядоченную графитовую структуру, при этом концентрация азота на поверхности увеличилась до 18 ат%, за счет присоединения гидрированного азота к краям графитовых фрагментов, а концентрация кислорода уменьшилась до 6 ат%. Отжиг датчика в атмосфере аргона и водорода привел к очистке поверхности, удалению кислородсодержащих групп и уменьшению доли sp^2 углерода на поверхности алмаза. Оставшийся неалмазный углерод в лазерных треках имеет более упорядоченную графитовую структуру. Было проведено сравнение фотоэлектрического отклика по отношению к излучению, генерируемому рентгеновской трубкой с медным анодом в режиме ускоряющих напряжений U от 0 до 8 кВ. На графитовые электроды, нанесенные лазером на поверхность алмазной пленки, подавалось постоянное напряжение от 3 до 300 В в зависимости от проводимости датчика. С ростом U наблюдалось увеличение тока, протекающего через алмаз при заданном постоянном напряжении. Природа фотоэлектрического отклика была связана с образованием дополнительных носителей заряда на поверхности алмаза при возбуждении рентгеновскими фотонами. При одинаковом напряжении 300 В, после обработки датчика в аммиаке величина отклика уменьшилась в 5 раз, что было связано с уменьшением сопротивления алмазных участков, расположенных между графитовыми электродами, из-за присоединения азотсодержащих групп. При ускоряющем напряжении трубки 8 кВ, отклик отожженного в водороде датчика увеличился до 144% при 300 В и до 580% при 50 В. Термическая обработка датчика в водороде привела к увеличению отклика на рентгеновское излучение в результате упорядочения структуры графитовых треков и удаления кислородсодержащих групп с их поверхности.

Работа была выполнена при финансовой поддержке РФФ (проект № 22-72-10097-П).

Исследование магнитных свойств галогенидных комплексов рения**А.Д. Федоренко, И.П. Асанов, С.Н. Бердюгин***Институт неорганической химии им. А.В. Николаева СО РАН,**просп. Акад. Лаврентьева 3, Новосибирск, Россия**fedorenko@niic.nsc.ru***DOI: 10.26902/Graphene-25-114**

Октаэдрические комплексы переходных металлов привлекают внимание научного сообщества в области молекулярного магнетизма, что находит применения в фотонике, спинтронике для термических сенсоров и оптических переключателей, в электронике и медицине в качестве микро-электромеханических систем. Использование соединений 5d-металлов с высокими значениями спин-орбитального взаимодействия может привести к появлению молекулярных магнетиков с большими температурами магнитной блокировки. Следует отметить, что одними из перспективных соединений являются комплексы Re(IV), обладающие большим значением спина $S = 3/2$ и высоким значением параметра магнитной анизотропии, связанной со спин-орбитальным взаимодействием. Комплексные соединения Re(IV) с электронной конфигурацией $5d^3$ являются привлекательными для магнитных исследований, обладая разнообразием симметрией структуры ближайшего окружения типа Oh и D_{4h} , в которых проявляется влияние суперобменных взаимодействий на магнитные свойства. Ионы Re(IV) проявляют склонность к образованию полиядерных соединений, посредством мостиковых связей, которые могут быть молекулярными магнетиками.

Поиск новых одномолекулярных магнетиков связан с получением высокого энергетического барьера переориентации спина, для чего необходим контроль как спина, так и значения параметра магнитной анизотропии. Для исследования свойств молекулярных магнитов важное значение имеют теоретические расчеты электронной структуры. Одно из направлений связано с поиском новых соединений на основании теоретических расчетов электронной структуры многоконфигурационными методами CASSCF/NEVPT2 и определения теоретических значений магнитной анизотропии комплексов переходных металлов.

В настоящей работе проведены исследования влияния замещения катиона на изменение электронной структуры и магнитные свойства соединений октаэдрических галогенидных комплексов $[\text{ReCl}_6]^{2-}$ с электронной конфигурацией иона Re $5d^3$. Проведенные исследования показывают, что в таких системах наличие спин-орбитального взаимодействия приводит к значительным искажениям Яна-Теллера. Было показано, что замещение катионов в ряду $(\text{NH}_4)_2 - \text{Pd}(\text{NH}_3)_2 - \text{Pt}(\text{NH}_3)_2$ приводит к искажению октаэдрической структуры и, следовательно, связано с изменением параметра магнитной анизотропии.

Квантовохимические расчеты были выполнены с использованием ресурсов ЦКП "Сибирский Суперкомпьютерный Центр ИВМиМГ СО РАН".

Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ (грант № 25-22-00228).

Эффект снижения вязкости наножидкостей на основе графена

Ф.К. Шабиев^{1,2}, Е.В. Галунин¹, Ю.В. Пахаруков^{1,2},
Р.Ф. Сафаргалиев^{1,2}, М.А. Вагнер¹, А.В. Шабиева³.

¹Тюменский государственный университет, ул. Володарского, д.6, г. Тюмень, Россия

²Тюменский индустриальный университет, ул. Володарского, д.38, г. Тюмень, Россия

³Тюменский государственный медицинский университет,
ул. Одесская, д.54, г. Тюмень, Россия

faridshab@mail.ru

DOI: 10.26902/Graphene-25-115

На сегодняшний день наножидкости используют для решения различных задач. Наножидкости на основе графена, как и наножидкости (НЖ) в целом – это дисперсные системы, отличающиеся от коллоидов рядом уникальных свойств (высокая теплопроводность, электропроводность и т. д.). Графенсодержащие наножидкости (ГНЖ) являются перспективными по сравнению с НЖ на основе металлов, полупроводников и их оксидов. Например, в обзорах [1,2] дано подробное описание новых перспективных ГНЖ, широко используемых в различных отраслях промышленности - от энергетики до пищевой. Существует ряд проблем, препятствующих развитию технологий, в основе которых использовались бы НЖ. Одной из таких проблем является аномально высокая вязкость НЖ. По устоявшейся теории вязкость пропорциональна квадрату объемной концентрации наночастиц. Однако, как показывают последние экспериментальные работы, хорошо представленные в обзоре [3], вязкость ГНЖ может уменьшаться при определенных диапазонах концентраций графена. В работе [4], представлена полуэмпирическая формула, позволяющая оценить вязкость ГНЖ, опираясь на процессы самоорганизации графеновых нанопластинок. В данном исследовании предлагается при помощи молекулярно-динамического моделирования показать процессы самоорганизации графеновых частиц и молекул базовой жидкости и объяснить механизмы снижения вязкости на молекулярном уровне.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 25-23-00318.

[1] Bahiraei M., Heshmatian S. // Energy Convers. Manag. 2019. V. 196. P. 1222.

[2] Rubbi F. et al. // J. Mol. Liq. 2021. V. 338. P. 116771.

[3] Hamze S., Cabaleiro D., Estellé P. // J. Mol. Liq. 2021. V. 325. P. 115207.

[4] Ali I. et al. // J. Mol. Liq. 2023. V. 390. P. 122954.

Первопринципное исследование композита на основе графена и оксида лития-кобальта

Шунаев В.В., Петрунин А.А., Глухова О.Е.

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

shunaevvv@squ.ru

DOI: 10.26902/Graphene-25-116

В настоящее время примерно 99,9% литий-ионных батарей в портативных электронных устройствах, в частности, смартфонах, – кобальтовые. LiCoO₂-аккумуляторы обладают сравнительно большой плотностью энергии (до 190 Вт·ч/кг) при номинальном напряжении 3,6 В, высокой теоретической ёмкостью (≈ 275 мА·Ч/г), а также относительно просты в изготовлении. Однако существуют и серьёзные недостатки. В частности, снимки сканирующего электронного микроскопа показывают, что частицы кобальтового катода в аккумуляторах имеют неправильную форму, а их поверхность изобилует трещинами, что приводит к значительному уменьшению диффузии лития. Это, с одной стороны, ограничивает срок службы катода, а с другой – позволяет достичь лишь половины теоретической ёмкости. Использование обладающего высокой проводимостью сверхпрочного графена в качестве покрытия или добавки к оксиду лития-кобальта позволяет увеличить срок службы катода, а также приводит к образованию стабильного двойного электрического слоя, что способствует значительному увеличению производительности аккумуляторов.

В рамках теории функционала плотности (DFT) в приближении локальной плотности (LDA), а также обобщенной градиентной аппроксимации (GGA) построена атомистическая суперъячейка 2D-композита графен/LiCoO₂ с массовыми соотношением компонентов 1:8. Установлено, что основным типом взаимодействия между компонентами является ван-дер-ваальсово Зонная структура полученного материала демонстрирует металлический тип проводимости.

Известно, что в низкоразмерных структурах помимо геометрической ёмкости важную роль играет дифференциальная квантовая ёмкость, отражающая изменение заряда с изменением уровня Ферми [2], а также интегральная квантовая ёмкость, которая является характеристикой плотности энергии материала. Максимальная дифференциальная и интегральная квантовые ёмкости наблюдались при 0 В и составили 1403,75 и 1100.00 Ф/г, соответственно. Анализ графика поверхностной плотности заряда показал, что рассматриваемый материал предпочтительно является катодом в случае, когда электролитами химических источников тока являются вода и ионная жидкость.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант № 25-22-00290).

[1] Zhang C. *et al.* // Appl. Surf. Science. 2014. V. 657. P. 159769.

[2] Luriy S. // Appl. Phys. Lett. 1988. V. 52. P. 501-503.

**Синтез вертикально ориентированных массивов УНТ на
комбинированных металлических субстратах****И.А. Бетке^{1,2}, О.А. Нерушев^{1,2}**¹Новосибирский государственный университет, ул. Пирогова 1, Новосибирск, Россия²Институт теплофизики им. С.С. Кутателадзе СО РАН, просп. Акад. Лаврентьева 1,
Новосибирск, Россияi.betke@g.nsu.ru**DOI: 10.26902/Graphene-25-117**

Углеродные нанотрубки, синтезируемые методом парофазного осаждения на плотной матрице каталитических наночастиц, растут вертикально ориентированным массивом, «лесом». Такие системы представляют высокий интерес для задач охлаждения микроэлектроники, поскольку тепло в таком массиве распространяется почти строго вдоль леса вертикально ориентированных нанотрубок [1].

Цель работы – оптимизировать режимы нанесения каталитических поверхностей и синтеза нанотрубок для получения упорядоченных «лесов» на различных подложках.

В настоящей работе каталитические поверхности синтезировались методом магнетронного напыления на гладких подложках кремния и меди. В простейшем случае каталитическим слоем выступает тонкая плёнка железа (до 10 нм). Для проведения каталитического роста нанотрубок плёнка отжигается в атмосфере аргона с водородом при температуре 700°C. В результате формируется сетка наночастиц с характерным диаметром 20-30 нм.

На фазе синтеза в систему подаётся ацетилен. На поверхности наночастиц молекулы ацетилена разлагаются на составляющие, углерод частично растворяется в железе. Затем в результате поверхностной и объёмной диффузии происходит формирование кристаллической гексагональной структуры углерода. При определенных условиях (температура, давление и состав газа) углеродные слои формируют трубчатую структуру. Проведено исследование зависимости параметров синтезированных нанотрубок от исходной толщины каталитического слоя. По результатам SEM-микроскопии показано, что при сравнительно неизменном диаметре нанотрубок (10-30 нм) с ростом толщины нанесенной плёнки железа уменьшается плотность «леса».

Для повышения качества каталитической поверхности методом магнетронного напыления были синтезированы более сложные слоистые гетероструктуры. Используются перемежающиеся слои оксида алюминия и железа, в которых распределение частиц катализатора на рабочей поверхности обеспечивается как исходной толщиной слоя железа и морфологией плёнки оксида алюминия, так и диффузией атомов железа из нижележащих областей через буферный слой оксида алюминия [2]. Показано, что это позволяет в несколько раз увеличить плотность синтеза углеродных нанотрубок.

[1] Esconjauregui S. *et al.* // ACS Nano 2010. V. 4. N. 12. P. 7431.

[2] Nahm M.G., Hashim D.P., Vajtai R. Ajayan P.M. // Carbon Lett. 2011. V. 12. N. 4. P. 185.

Активированные угли из уплотнённой биомассы для суперконденсаторов на неводных электролитах: подход к дизайну пористой структурыО.А. Бородина^{1,2}, П.М. Елецкий^{1,2}, М.В. Лебедева^{1,2}, М.А. Мозылева^{1,2}, В.А. Яковлев^{1,2}¹Институт катализа им. Г.К. Борескова СО РАН,
просп. Акад. Лаврентьева 5, Новосибирск, Россия²Новосибирский государственный университет, ул. Пирогова, 1, Новосибирск, Россия
o.borodina@g.nsu.ru**DOI: 10.26902/Graphene-25-118**

Суперконденсаторы (СК) — устройства для накопления энергии, занимающие промежуточное положение между конденсаторами и электрохимическими аккумуляторами. Они находят применение в качестве источников питания в электромобилях и гибридных транспортных средствах, а также в микроэлектронике. Для накопления большого количества энергии в суперконденсаторах используются пористые электродные материалы, наиболее доступным среди которых является активированный уголь (АУ).

Перспективным типом сырья для АУ является растительная биомасса. Особый интерес представляют косточки плодов и скорлупа орехов, обладающие повышенной плотностью и твердостью. Эти свойства могут сохраняться у получаемых АУ. Скорлупа кедровых орехов (СКО) — побочный продукт промышленной заготовки данного ореха, в значительных количествах образующегося в Сибири и на Дальнем Востоке.

Использование ионных жидкостей и растворов органических электролитов для АУ позволяют работать в более широком диапазоне потенциалов по сравнению с водными растворами кислот или щелочей (до 2,5–2,7 В). Материалы электродов СК на неводных электролитах должны иметь следующие характеристики: удельная поверхность по БЭТ не менее ~ 1500 м²/г, микро-мезопористая структура с максимально возможной долей поверхности пор, доступной для электролита [1]. Активация с использованием фосфорной кислоты позволяет получить АУ с необходимой пористой структурой и большим выходом по сравнению с подходами активации с использованием других активирующих агентов, однако удельная поверхность таких АУ, как правило, не превышает 1500 м²/г по БЭТ [2, 3].

Данная работа посвящена разработке подхода к улучшению метода фосфорнокислотной активации для получения АУ с более развитой пористостью для возможности их применения в качестве электродных материалов СК на неводных электролитах. Было обнаружено, что при повышении температуры сушки смесей АУ с ортофосфорной кислотой можно добиться значительного улучшения текстурных характеристик получаемых активированных углей. В результате экспериментов была получена серия образцов АУ с $A_{БЭТ}$ до 2700 м²/г путем варьирования таких параметров, как температура активации и соотношение Н₃РО₄ к сырью. Образцы были охарактеризованы с помощью методов СЭМ, ПЭМ и РФЭС, а также был проведен элементный анализ CHNS-O и РФЮА.

Испытания полученных АУ в качестве электродных материалов для СК в электролите 1 М ВММВF₄/ацетонитрил показали, что емкость электродов зависит как от площади поверхности по БЭТ, так и от размера пор, и достигает ~ 120 Ф/г при плотности тока разряда 0,2 А/г.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства Науки и Высшего образования РФ в рамках государственного задания для Новосибирского Государственного Университета (проект № FSUS-2025-0014), а также для ФИЦ Института катализа СО РАН (проект № FWUR-2024-0038).

[1] Yeletsky P.M., Lebedeva M.V., Yakovlev V.A. // J. Energy Storage. 2022. V. 50. P. 1.

[2] Qin L. et al. // J. Electroanal. Chem. 2020. V. 866. P. 1.

[3] Ma W. et al. // Electrochim. Acta. 2018. V. 266. P. 420.

Исследование алмазообразования в биграфене на металлических подложках

Л.А. Варламова, С.В. Ерохин, П.Б. Сорокин

*Национальный исследовательский технологический университет «МИСиС»,**Ленинский пр. 4 стр. 1, Москва, Россия**varlamova.la@isis.ru***DOI: 10.26902/Graphene-25-119**

Двумерный алмаз или диаман — это низкоразмерная углеродная структура, чьи физико-химические свойства делают ее крайне перспективной для применения в различных областях физики, от нанооптики до квантовых вычислений [1].

Синтез атомарно тонких алмазоподобных пленок из многослойного графена — это сложный процесс, требующий значительных энергетических затрат, в том числе применения высоких давлений и температур. В частности, двухслойный диаман, являющийся одной из самых тонких sp^3 -гибридизованных пленок, невозможно стабилизировать, не пассивировав его поверхность сторонними атомами, например водородом. Этот процесс, известный как химически индуцированный фазовый переход, изменяет поверхностную энергию путем адсорбции атомов или различных функциональных групп на графен, изменяя тем самым гибридизацию атомов углерода с sp^2 на sp^3 . Такое изменение способствует образованию межслоевых углерод-углеродных связей между слоями графена, в результате чего образуется полностью sp^3 -гибридизованная пленка со структурой алмаза [2].

Хотя полная пассивация биграфена атомами водорода и последующее соединение углеродных слоев является энергетически выгодным, начальные стадии процесса нуклеации алмазной фазы требуют значительных энергетических затрат [3]. Тем не менее, формирование алмазной пленки упрощается в случае, когда графеновый слой стабилизируется металлической подложкой [4].

В представленной работе подробно изучается процесс образования алмазной фазы на атомном уровне в биграфене, расположенном на металлической подложке. В работе был смоделирован постадийный рост sp^3 -гибридизованного кластера в sp^2 -гибридизованной пленке вплоть до перехода к полностью алмазоподобной структуре. В качестве альтернативного пути образования алмаза было так же рассмотрено прямое соединение листов графена, расположенных на металлических подложках, между собой за счет их сближения под действием внешнего давления.

Было изучено образование алмазной пленки на типичных металлических поверхностях, таких как Ni (111), Cu (111) и Pt (111). Помимо этого, была рассмотрена возможность использования Pt, в качестве источника водорода для пассивации графена, расположенного на ее поверхности [5].

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ (грант № 25-79-20049)

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

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

[3] Erohin S.V. et al. // Small. 2020. V. 16. № 47. P. 2004782.

[4] Bianchini F. et al. // J. Phys. Chem. Lett. 2014. V. 5. № 3. P. 467.

[5] Varlamova L.A., Erohin S.V., Sorokin P.B. // J. Phys. Chem. Lett. 2024. P. 11927.

Изучение сенсорных свойств гибридных материалов на основе ОУНТ и тетрацианохинодиметана

Т.А. Герасева, В.И. Сысоев, А.В. Окотруб

*Институт неорганической химии им. А.В. Николаева СО РАН,
просп. Акад. Лаврентьева 3, Новосибирск, Россия**t.geraseva@g.nsu.ru***DOI: 10.26902/Graphene-25-120**

Углеродные нанотрубки (УНТ) являются предметом многочисленных исследований за счёт своих уникальных физико-химических свойств. Особый интерес представляют структуры из УНТ, т.к. они имеют большой потенциал для использования в изготовлении различных устройств, например, газовых сенсоров, которые имеют широкий спектр областей применения, включающий биомедицину, промышленность, экологию и т.д.

В данной работе рассматривается применение одностенных УНТ (ОУНТ) в качестве чувствительного материала для резистивных газовых сенсоров. Преимуществами таких сенсоров являются простота и дешевизна производства, а также простота в получении и обработке сигнала. Главным недостатком – невысокая селективность. По той причине, что сеть из ОУНТ, лежащая в основе газового сенсора, проявляет донорные свойства, детектирование газа, обладающего аналогичными электронными характеристиками, представляет наибольшее затруднение. Основными методами повышения селективности сенсоров на основе ОУНТ являются присоединение функциональных групп, введение гетероатомов в углеродную структуру, а также нековалентная модификация поверхности органическими веществами, полимерами, металлическими и полупроводниковыми наночастицами. Данная работа посвящена повышению селективности газовых сенсоров на основе ОУНТ при помощи поверхностной нековалентной модификации органической молекулой тетрацианохинодиметана (TCNQ). Такая модификация сети ОУНТ приводит к перераспределению электронной плотности углеродной структуры, которое повышает чувствительность к аналитом донорного типа.

Результатом работы стали:

1. Разработка метода оценки эквивалентности образцов на основе исходных ОУНТ, благодаря которому удалось найти оптимальные параметры изготовления сенсоров для повышения повторяемости ОУНТ плёнок.
2. Разработка метода получения TCNQ/ОУНТ на основании данных об изменении проводимости при синтезе, спектроскопии комбинационного рассеяния света, растровой электронной микроскопии, рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии и установление оптимальных параметров синтеза гибридного материала.
3. Исследование сенсорных свойств TCNQ/ОУНТ на донорные аналиты, а также некоторые пары летучих органических соединений в зависимости от параметров осаждения TCNQ.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ (грант № 24-73-10039)

Использование углеродных материалов для электрохимического обнаружения ионов металлов в водных растворах**С.Н. Ельсукова^{1,2}, Ю.В. Федосеева²**¹ Новосибирский государственный технический университет,
просп. К. Маркса 20, Новосибирск, Россия² Институт неорганической химии им. А.В. Николаева СО РАН
просп. Акад. Лаврентьева 3, Новосибирск, Россия
sofi.elsu@yandex.ru**DOI: 10.26902/Graphene-25-121**

За последнее десятилетие произошел стремительный рост промышленного производства, в результате чего увеличилось количество выбросов отходов в окружающую среду. Биоаккумуляция ионов металлов в организме является одной из главных проблем современной экологии. Понимание механизмов обнаружения ионов тяжелых металлов является одной из фундаментальных задач современной науки. Электрохимические сенсоры с электродами из углеродных материалов являются перспективным инструментом для обнаружения ионов за счет своей чувствительности, надежности и простоты в использовании. Углеродные материалы обладают высокими сенсорными характеристиками, высокой электропроводностью и стабильностью. Целью данной работы является обнаружение ионов Fe^{3+} , Co^{2+} , Sn^{2+} , Cd^{2+} в водном электролите с использованием графита и пористого углеродного материала (ПУМ) в качестве электродов электрохимического сенсора.

Графитовый электрод размером 2x5 мм и толщиной 2 мм выпиливали при помощи напильника из графитового стержня. Электрод из пористого углеродного материала изготавливался путем добавления к ПУМ связующего PVDF и растворителя этанол, с последующей гомогенизацией и раскаткой смеси до однородной тонкой пленки. Электрохимические измерения проводились на потенциостате BioLogic в диапазоне напряжений от -0,3 до 0,7 В на скоростях развертки от 1000, 500, 200, 50 и 5 мВ/с. Электрод сравнения – хлорсеребряный. Сенсорные свойства электродов исследовали при добавлении растворов FeCl_3 , CoCl_2 , CdCl_2 , SnCl_2 с концентрацией 0,025 М – 0,2 М к водному раствору 1 М KCl + 10 мМ $\text{K}_3[\text{Fe}(\text{CN})_6]$, выступающему в качестве электролита. Электрод из ПУМ оказался более чувствительным к изменению потенциала. Его ЦВА кривые симметричные с пиком окислительно-восстановительной реакции на 0,3 В, соответствующей редокс-паре $([\text{Fe}(\text{CN})_6]^{4-}/[\text{Fe}(\text{CN})_6]^{3-})$, и ярко выраженным сдвигом среднего потенциала между анодным и катодным пиком после добавления ионов металлов в раствор электролита. Наибольший сдвиг потенциала между анодным и катодным пиком потенциала был обнаружен у ионов Cd^{2+} .

Влияние легирования Со материалов на основе MoS₂ и графена в натрий-ионных аккумуляторах

А.А. Загузина, А.Д. Федоренко, А.В.Окотруб, Л.Г. Булушева
Институт неорганической химии им. А.В. Николаева СО РАН
просп. Акад. Лаврентьева 3, Новосибирск, Россия
kotsun@niic.nsc.ru

DOI: 10.26902/Graphene-25-122

В условиях постоянно растущего спроса на портативные источники энергии, исследование новых материалов для щелочных металл-ионных аккумуляторов становится актуальной задачей. Натрий-ионные аккумуляторы (НИА) являются многообещающей заменой широко распространённым литий-ионным аккумуляторам (ЛИА) благодаря их более низкой стоимости. Тем не менее, разработка НИА находится на начальной стадии и сталкивается с рядом недостатков, связанных с медленной кинетикой электрохимических процессов и с отсутствием структурной стабильности из-за большого изменения объема анодного материала. Это связано с большим ионным радиусом 0,102 нм Na⁺ по сравнению с 0,076 нм Li⁺ [1]. Одним из ключевых аспектов, определяющих эффективность НИА, является выбор анодного материала. Дисульфид молибдена (MoS₂) привлекает внимание благодаря своим уникальным свойствам, таким как высокая теоретическая емкость (669 мАч/г) и слоистая структура с большим расстоянием между слоями. Использование MoS₂ ограничивает низкая электропроводность и деградация материала при долговременном циклировании. Наиболее эффективными стратегиями для комплексного улучшения электрохимических характеристик MoS₂ является создание гетероатомных дефектов и гетероинтерфейсов с углеродом.

В данной работе мы использовали данные подходы совместно для получения наноматериалов легированных Со и композитов с графеном (Со-MoS₂, MoS₂/G и Со-MoS₂/G). Материалы были получены быстрым термолизом в атмосфере аргона из аэрогелей смешенного состава. В качестве прекурсоров использовали тиомолибдат аммония, оксид графита и ацетат кобальта. Использование такого подхода позволяет эффективно настраивать электронные свойства, приводит к появлению дополнительных центров адсорбции натрий-иона и улучшению циклической стабильности MoS₂. Структура и состав наноматериалов были охарактеризованы методами ПЭМ, КРС, РФА, РФЭС. Из образцов были изготовлены электроды и собраны электрохимические полужайки, с металлическим натрием в качестве противоелектрода.

В НИА образец Со-MoS₂/G демонстрирует лучшие значения удельной емкости 234, 187 и 141 мАч/г при плотности тока 10, 20 и 50 А/г, соответственно. Со легированный образец показывает стабильную работу при длительном циклировании в течении 500 циклов при плотности тока 10 А/г.

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

[1] Song K. *et al.* // Small. 2021. V. 17. N. 9. P. 1903194.

Сорбционные свойства графенов с кислород- и азотсодержащими функциональными группами для концентрирования РЗЭ и других элементов из растворовВ.Д. Курбатова¹, Н.С. Медведев¹, А.О. Фролова^{1,2}, А.И. Сапрыкин^{1,2}, В.Г. Макотченко¹¹ Институт неорганической химии им. А.В. Николаева СО РАН,
просп. Акад. Лаврентьева 3, Новосибирск, Россия² Новосибирский государственный университет, ул. Пирогова, 1, Новосибирск, Россия
kurbatova@niic.nsc.ru**DOI: 10.26902/Graphene-25-123**

С развитием промышленности увеличивается выброс в окружающую среду редкоземельных элементов (РЗЭ) и тяжелых металлов (ТМ). Влияние РЗЭ на организм человека изучено мало, но со временем это может стать актуальной проблемой, а негативное влияние ТМ на организм широко известно. Поэтому важно контролировать содержание РЗЭ и ТМ в экологических и биологических объектах, которые в большинстве случаев представляют собой растворы. Высокоинформативными методами количественного химического анализа, позволяющими одновременно определять концентрации большого числа аналитов в растворах, являются масс-спектрометрия с индуктивно связанной плазмой (ИСП-МС) и атомно-эмиссионная спектрометрия с индуктивно связанной плазмой (ИСП-АЭС). Из-за влияния основных компонентов проб и низкого содержания аналитов в ряде случаев пределов обнаружения (ПО) аналитов, которые обеспечивают методы ИСП-МС и ИСП-АЭС бывает недостаточно для контроля примесного состава проб на требуемом уровне концентраций. Сорбционное концентрирование позволяет снизить ПО аналитов. Материалы на основе графена обладают выдающимися сорбционными свойствами, а их применение для сорбции РЗЭ и ТМ это актуальное направление исследований. В настоящей работе изучены сорбционные свойства оксида графена, полученного разными способами синтеза, относительно группового концентрирования РЗЭ и других аналитов из растворов, для последующего анализа методами ИСП-АЭС и ИСП-МС. Изучены также сорбционные свойства графена и оксида графена, модифицированных азотсодержащими функциональными группами, которые позволяют значительно увеличить их сорбционную емкость. Получены данные о степени извлечения аналитов в зависимости от условий сорбции и выбраны оптимальные условия процедуры сорбционного концентрирования аналитов.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант № 25-23-00245).

Влияние модифицирования поверхности МСМ-41 графитоподобным нитридом углерода на каталитические свойства Pd и Ag катализаторов в реакции получения водорода из муравьиной кислоты

Т.Д. Крючков^{1,2}, Ф.С. Голубь¹, Е.Ю. Герасимов¹, И.П. Просвирин¹, Д.А. Булушев¹

¹Институт катализа им. Г.К. Борескова СО РАН,
просп. Акад. Лаврентьева 5, Новосибирск, Россия

²Новосибирский государственный университет, ул. Пирогова 1, Новосибирск, Россия

t.kryuchkov@g.nsu.ru

DOI: 10.26902/Graphene-25-124

Водородная энергетика является актуальным направлением развития зелёной химии. Существенной проблемой применения водорода в качестве источника энергии является опасность его транспортировки и хранения. Подходом к решению данной проблемы является использование жидких органических носителей водорода, одним из которых является муравьиная кислота (МК). К её преимуществам можно отнести высокую энергетическую плотность (как у H_2 при 700 бар), стабильность, безвредность для окружающей среды и возможность получения из возобновляемой растительной биомассы. В настоящей работе показан способ синтеза композитного носителя с необходимыми текстурными характеристиками [1] – высокой удельной площадью поверхности и высоким содержанием азотных центров. Для этого мезопористый силикат МСМ-41 пропитывали меламином (соотношение 2:1 по массе) и прокаливали при температуре 400 °С на воздухе в течение 2 ч (образец mel/МСМ-41). Таким образом на поверхности МСМ-41 формировались фрагменты насыщенного азотом графитоподобного нитрида углерода ($g-C_3N_4$), что подтверждают данные рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии (полосы C 1s 288 эВ и N 1s 398.5 и 400 эВ) и просвечивающей электронной микроскопии высокого разрешения. На основе полученного носителя были приготовлены 4 катализатора с различной структурой и массовым содержанием металла 1 вес. %: Ag_1 , Pd_1 , $Ag_{0,5}@Pd_{0,5}$ (последовательное нанесение солей металлов), $Ag_{0,5}-Pd_{0,5}$ (одновременное нанесение солей металлов). Средний размер частиц в катализаторах был оценён методом ПЭМ-ВР и составил 4,1; 4,1; 3,2; 4,5 нм соответственно. Испытание катализаторов в реакции получения водорода из МК показало, что в температурном диапазоне 120 – 220 °С активность увеличивалась в ряду: $Ag_1 \ll Ag_{0,5}-Pd_{0,5} < Ag_{0,5}@Pd_{0,5} \ll Pd_1$. Все образцы проявили высокую селективность образования водорода (> 99%). Наиболее активным оказался образец Pd_1 , продемонстрировавший активность в пять раз превышающую активность Pd, нанесённого на $g-C_3N_4$. Значения кажущейся энергии активации при этом, совпали (44 кДж/моль), что может свидетельствовать о схожей природе активных центров. Таким образом, данные физико-химических методов исследования свидетельствуют о том, что повышение каталитической активности связано с улучшенными свойствами носителя. Нанесение $g-C_3N_4$ на поверхность МСМ-41 позволило увеличить площадь поверхности носителя с 15 до 377 м²/г и внедрить 3 ат. % азота (РФЭС).

Работа выполнена при финансовой поддержке министерства науки и высшего образования РФ (проект FWUR-2024-0036).

[1] Golub F.S. et al. // Int. J. Hydrogen Energy. 2023. V. 48. N. 59. P. 22439.

**Синтез и исследование металл-углеродных систем
в реакции гидрирования CO₂ в различных условиях**

А.Ю. Нефедова, А.Н. Коробова, О.Ю. Подъячева
*Институт катализа им. Г.К. Борескова СО РАН,
просп. Акад. Лаврентьева, 5, Новосибирск, Россия*
a.nefedova1@g.nsu.ru

DOI: 10.26902/Graphene-25-125

Реакция каталитического гидрирования CO₂ является одной из перспективных возможностей превращения CO₂ в ценные продукты и позволяет снизить потребление традиционного ископаемого топлива. В зависимости от типа катализатора и условий проведения реакции можно получать углеводороды (метан, жидкие углеводороды и олефины), оксигенаты (метанол, спирты C₂+, диметиловый эфир, органические карбонаты, карбоновые кислоты) и окись углерода [1]. Наиболее хорошо изученными процессами являются реакции гидрирования CO₂ на нанесенных металлических катализаторах при атмосферном давлении и температурах выше 300°C с получением метана и СО. Вместе с тем, разработка эффективного процесса гидрирования CO₂ в муравьиную кислоту (МК), которая протекает при повышенных давлениях, открывает возможность реализации цикла химического накопления водорода с помощью МК [2]. Работа посвящена синтезу и исследованию металл-углеродных систем в реакции гидрирования CO₂ в различных условиях (температура, давление, соотношение компонентов).

Синтезированы металл-углеродные системы состава Fe-Ni-C и Fe-Ni-N-C методом CCVD разложением этилена и 40% C₂H₄/60% NH₃ смеси на катализаторе роста 62% Fe-8% Ni-30% Al₂O₃. При проведении реакции в течение определенного времени формируются 1D многостенные углеродные нанотрубки и азотсодержащие углеродные нанотрубки, содержащие катализатор роста в количестве 20 вес.%. Синтезированные металл-углеродные системы исследованы методами РФА, БЭТ и аналитическим методом.

Исследована активность Fe-Ni-C и Fe-Ni-N-C металл-углеродных систем в реакции гидрирования CO₂ при атмосферном давлении и соотношении CO₂:H₂=1:4 в интервале температур 20-500°C. При 500°C конверсия CO₂ составила 40%, а основным продуктом являлась окись углерода (S=99,8%). Обнаруженная активность металл-углеродных систем подтверждает доступность Fe-Ni катализатора роста углеродных материалов к участию в реакции гидрирования.

Обнаружено отсутствие протекания реакции гидрирования CO₂ в муравьиную кислоту при давлении до 40 атм, температуре до 150°C и соотношении CO₂:H₂=1:1 на синтезированных металл-углеродных системах. Показано, что дополнительное нанесение палладия (0,5-5 вес.%) на Fe-Ni-C и Fe-Ni-N-C способствует протеканию реакции селективного образования муравьиной кислоты (> 99%). Установлено положительное влияние увеличения количества нанесенного палладия и присутствия азота в углеродном материале на скорость реакции.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ (грант № 25-23-00090).

[1] Дементьев К.И. и др. // Нефтехимия. 2022. Т. 62. № 3. С. 289.

[2] Wang Z. et al. // Catalysts. 2023. V. 13. P. 1168.

Влияние дефектности многослойного графена на его сенсорные характеристикиМ.А. Новиков^{1,2}, К.М. Попов¹, В.И. Сысоев¹, А.В. Окотруб^{1,2}¹*Институт неорганической химии им. А.В. Николаева СО РАН,
просп. Акад. Лаврентьева 3, Новосибирск, Россия*²*Новосибирский государственный университет, ул. Пирогова 1, Новосибирск, Россия
m.novikov4@g.nsu.ru***DOI: 10.26902/Graphene-25-126**

С развитием промышленности и ростом численности населения всё более актуальной становится проблема контроля выброса в атмосферу различных загрязняющих газов. В связи с этим увеличивается потребность в разработке портативных сенсорных устройств. Наиболее подходящими для этих целей являются резистивные газовые сенсоры, так как они отличаются низкой стоимостью, малым энергопотреблением, простотой регистрации сигнала и возможностью интеграции в электронные схемы. Графен – монослой атомов углерода – является перспективным материалом для создания чувствительных элементов газовых датчиков. Это обусловлено двумерной структурой графена и его уникальными физико-химическими свойствами, такими как большая удельная поверхность, высокая электропроводность, а также эффективная адсорбция молекул разнообразных газов.

Настоящая работа посвящена изучению влияния дефектности графеновых пленок на их сенсорные свойства. Синтез графена на медной подложке проводился методом химического осаждения из газовой фазы (CVD) из смеси метана и водорода при пониженном давлении. Проведено исследование влияния условий предварительного отжига медной фольги и параметров CVD-синтеза на дефектность и структуру образцов графена, что оценивалось с помощью спектроскопии комбинационного рассеяния света и рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии.

Для исследования сенсорных свойств образцы графена были перенесены на кремниевые подложки. Сопротивление графеновых пленок составило 10-70 кОм/кв при комнатной температуре в зависимости от условий синтеза. Полученные материалы протестированы на циклическое воздействие низких концентраций диоксида азота и аммиака при комнатной температуре, а также при более высоких температурах для достижения оптимальной скорости регенерации сенсора. Изучено влияние газа-разбавителя и температуры на сенсорный отклик по отношению к NO₂. Оценены энергии связывания и тепловые эффекты реакций адсорбции диоксида азота на пленке графена.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ (грант №24-73-10039).

Схемы из мемристоров на основе фторированного графенаА.Д. Пулик^{1,2}, А.И. Иванов^{1*}, И.В. Антонова^{1,2}¹Институт физики полупроводников им. А.В. Ржаснова СО РАН,
просп. Акад. Лаврентьева 13, Новосибирск, Россия²Новосибирский государственный технический университет,
просп. К. Маркса, 20, Новосибирск, Россияart.iv.il@mail.ru**DOI: 10.26902/Graphene-25-127**

Разработка матриц на основе мемристоров для создания нейроморфных сетей и реализации нейроморфных вычислений является одной из актуальных задач сегодняшнего времени. Также привлекательно изготовление гибких устройств, которые можно деформировать без потери функциональных свойств, размещать на теле человека, встраивать в одежду или структуру биоподобных роботов. Современные двумерные материалы, такие как оксид графена, фторированный графен, MoS₂ и другие продемонстрируют возможность их использования для изготовления устройств гибкой и носимой электроники, в частности перспективы разработки на их основе тонкопленочных мемристоров.

В данной работе нами предложен метод формирования многослойных мемристорных матриц с кроссбар архитектурой на основе активных слоёв из плёнок фторированного графена на поливиниловом спирте, как представлено на Рис. 1а и 1б. Мемристорные матрицы были изготовлены печатью с использованием струйного 2D-принтера Dimatix Fujifilm-2831 на гибких подложках из полиэтилентерефталата (ПЭТ), контакты выполнены графеновых частиц. На Рис. 1в представлены вольт-амперные характеристики матриц с биполярным резистивным эффектом. Величина эффекта переключений зависит от толщины мемристорного слоя, уровня расположения мемристора в матрице относительно поверхности структуры и длительности температурной обработки.

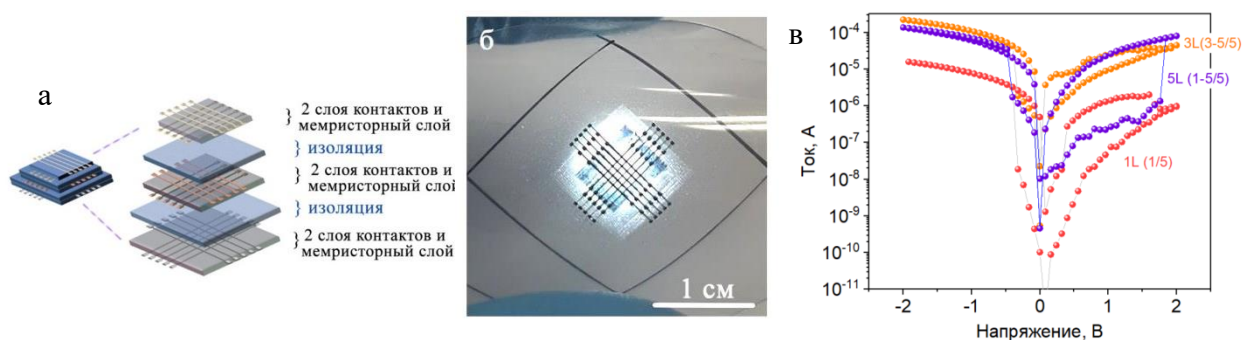


Рис. 1. Схематичное представление структуры многослойной матрицы мемристоров (а), фотоизображение матрицы (б), вольт-амперные характеристики с мемристорными переключениями (в), толщина мемристорного слоя (L) и его расположение в структуре приведены в качестве параметров.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ (грант № 25-19-20035).

Исследование сенсоров дыхания с активным слоем на основе графена**Я.И. Растяпин¹, И.В. Антонова^{1,2}, А.И. Иванов²**¹Новосибирский государственный технический университет,
просп. К. Маркса, 20, Новосибирск, Россия²Институт физики полупроводников им. А.В. Ржанова СО РАН,
просп. Акад. Лаврентьева 13, Новосибирск, Россияrastyapin.y@mail.ru**DOI: 10.26902/Graphene-25-128**

Разработка высокоточных сенсоров позволяет усовершенствовать методы аналитической химии в медицине, в том числе для анализа выдыхаемого воздуха. Большим потенциалом в рамках создания химических сенсоров для анализа дыхания обладает графен. Неинвазивные сенсоры на графене предлагают ряд преимуществ в сравнении с традиционными методами анализа, имеют огромные перспективы применения для широкого спектра приложений. В данной работе рассмотрены сенсоры с активным слоем на основе нанесённых струйной печатью различных структур графена: слои графена, полученного в плазме, слои на основе расщепленного природного графита и на основе электрохимически расслоённого терморасширенного графита (ТРГ). Тестировался отклик сенсоров на дыхание. В случае природного графита наблюдается уменьшение проводимости при воздействии дыхания, а в случае плазмохимического графена и ТРГ – увеличение, у сенсоров на основе этих материалов в композиции с PEDOT:PSS достигается наилучшая чувствительность. Увеличение времени воздействия дыхания проявляет сложную структуру пиков – появляется от 3 до 6 дополнительных пиков, связанных с реакцией на различные газы выдыхаемого воздуха. Были созданы структурированные сенсоры в виде отдельных полос графена с разной степенью разделения, в их откликах гасится пик влажности, становится более различима структура дополнительных пиков (Рис. 1). Воздействие лазерного излучения при снятии откликов на дыхание приводит к изменению амплитуд ряда пиков адсорбированных веществ за счёт ускоренного испарения или стимулированной адсорбции в зависимости от энергии лазерной подсветки.

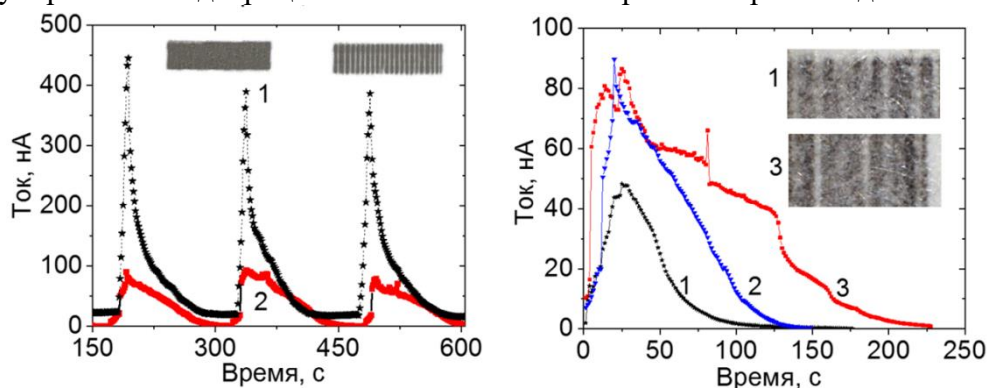


Рис. 1. Отклики структурированных сенсоров

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РНФ №25-19-20035.

Влияние композитного нанопокрyтия графен/Cu на механические свойства поверхности меди: атомистическое моделированиеЕ.А. Рожнова¹, Л.Р. Сафина², К.А. Крылова², Ю.А. Баимова^{1,2}¹Уфимский университет науки и технологий, ул. Заки Валиди 32, Уфа Россия²Институт проблем сверхпластичности металлов РАН, ул. Халтурина 39, Уфа, Россияrozhnova.elizaveta@mail.ru**DOI: 10.26902/Graphene-25-129**

Благодаря своим уникальным свойствам, таким как повышенная коррозионная стойкость, прочность и твердость, графен считается одним из наиболее перспективных материалов для улучшения свойств металлов. Одной из важных задач является повышение механических свойств металла, а также защита его поверхности от различных внешних факторов. В настоящей работе методом молекулярной динамики (МД) исследуется влияние композитного нанопокрyтия графен/Cu на прочность и твердость поверхности Cu.

Начальная структура представляет собой монокристалл Cu с размерами 15.1×15.1×5.2 нм, который покрывается композитной нанопленкой толщиной 2,4 нм. На Рис. 1 показана начальная структура монокристалла Cu с нанопокрyтием. Механические свойства композита оцениваются в процессе одноосного растяжения при комнатной температуре. Для определения твердости поверхности меди с композитным покрyтием применялся метод Оливера-Фарра при температуре 10 К. Численные эксперименты проводятся в свободно распространяемом пакете МД моделирования LAMMPS. Для описания взаимодействия атомов C-C, Cu-C, Cu-Cu используются потенциалы, представленные в работе 0.

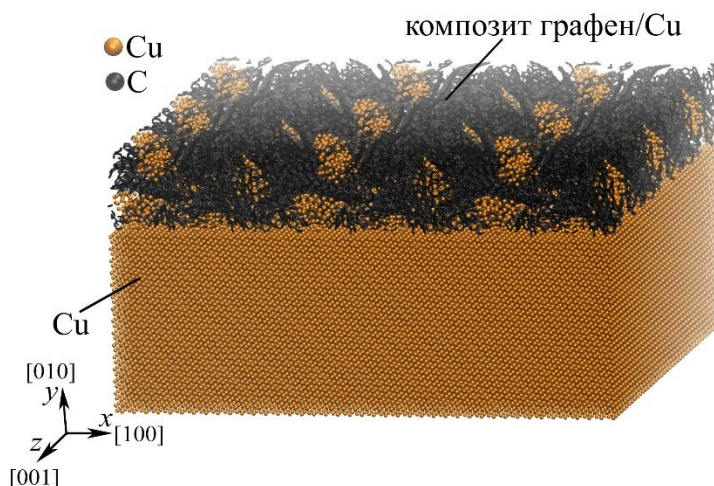


Рис. 1. Начальная структура монокристалла Cu с композитным покрyтием графен/Cu толщиной 2.4 нм после релаксации.

В результате моделирования выявлено, что нанесение композитного покрyтия на поверхность Cu приводит к значительному повышению прочности материала. При одноосном растяжении предел прочности Cu с композитным покрyтием более чем в два раза выше, по сравнению с монокристаллической Cu. Нанотвердость поверхности меди с покрyтием возрастает на 6%. В результате установлено, что композитное нанопокрyтие графен/Cu благодаря высокой прочности и неплохой твердости может применяться в качестве упрочняющего и защитного материала для деталей ответственного назначения, работающих в агрессивной среде и подверженные сильному трению и износу.

[1] Safina L.R. *et al.*// Comput. Phys. Commun. 2024. V. 301. P. 109235.

Синтез углеродных нановолокон в реакции разложения метана на массивных Ni-Cu сплавах

Р.А. Сайгареев^{1,2}, С.Д. Афонникова², Ю.И. Бауман², Ю.В. Шубин^{1,3}, И.В. Мишаков^{1,2}

¹Новосибирский государственный университет,
ул. Пирогова 1, Новосибирск, Россия

²Институт катализа им. Г. К. Борескова СО РАН,
просп. Акад. Лаврентьева 5, Новосибирск, Россия

³Институт неорганической химии им. А.В. Николаева СО РАН,
просп. Акад. Лаврентьева 3, Новосибирск, Россия

r.saigareev@g.nsu.ru

DOI: 10.26902/Graphene-25-130

Углеродные нановолокна (УНВ) обладают рядом свойств, привлекающих внимание исследователей из разных областей науки и техники. Среди них можно выделить химическую инертность, высокую удельную поверхность и электропроводимость. УНВ могут использоваться как носители для каталитических систем, сорбенты или структурные добавки в композитных материалах.

Один из самых распространенных методов синтеза УНВ – каталитический пиролиз углеводородов (осаждение из газовой фазы, CCVD). Он отличается простотой реализации и возможностью масштабирования. Основными компонентами катализаторов данного процесса являются металлы триады железа (Fe, Co, Ni) и сплавы на их основе. В основном применяют дисперсные металлические частицы, нанесенные на различные носители, но также возможно использование массивного сплава [1]. В случае применения массивных сплавов центры роста углеродных структур формируются непосредственно в реакционной среде. Данный подход основан на явлении углеродной эрозии, обеспечивающей самоорганизацию катализатора – дезинтеграцию частиц и формирование активных каталитических центров.

В нашей работе мы исследовали процесс пиролиза CH_4/H_2 смеси на массивном сплавном 70Ni30Cu катализаторе, полученном методом механохимического сплавления.

В докладе будет обсуждено влияние условий реакции (концентрация водорода в смеси (5 – 50 об. %), температура пиролиза, нагрузка на катализатор, продолжительность эксперимента) на активность массивного катализатора. Подробно будет обсуждена зависимость морфологии и текстурных параметров образующегося углеродного материала от вышеперечисленных условий процесса пиролиза CH_4/H_2 смеси.



Рис. 1. Фотография углеродного продукта, полученного в реакции пиролиза метана на сплавном массивном 70Ni30Cu катализаторе при 650 °C

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 22-13-00406-П, <https://rscf.ru/project/22-13-00406/>.

[1] Afonnikova S.D. et al. // J. Compos. Sci. 2023. V. 7. N. 6. P. 238.

**Деформация кручения СООН-N-МУНТ
как инструмент управления высвобождением белка HIF-1 α**
Т.А. Сапежинская¹, Н.Г. Бобенко¹, В.В. Шунаев², О.Е. Глухова^{1, 2, 3}

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

²Саратовский государственный университет им. Н.Г. Чернышевского,
ул. Астраханская 83, Саратов, Россия

³Первый Московский государственный медицинский университет им. И.М. Сеченова,
ул. Трубецкая д. 8 стр. 2, Москва, Россия

litanyaalex@ispms.ru

DOI: 10.26902/Graphene-25-131

Многослойные углеродные нанотрубки, легированные азотом и функционализированные карбоксильными группами (СООН-N-МУНТ), представляют интерес для целенаправленной доставки биологических молекул благодаря высокой реакционной способности и возможности настройки их поверхности посредством функционализации и деформации. Важной практической задачей является управление высвобождением белков, в частности, индуцируемого гипоксией фактора 1-альфа (HIF-1 α), который играет ключевую роль в патогенезе опухолевых и сердечно-сосудистых заболеваний [1]. Практическую ценность для медицинских исследований имеет определение оптимальной поверхности СООН-N-МУНТ, обеспечивающей стабильный и контролируемый выход белка за счёт диффузионно-волнового механизма [2,3]. В данной работе исследуется влияние деформации кручения СООН-N-МУНТ на высвобождение HIF-1 α при фиксированной концентрации кислорода в карбоксильных группах.

В рамках метода SCC DFTB построены атомистические ячейки поверхности СООН-N-МУНТ с концентрацией кислорода в карбоксильных группах 2,7 ат.%, к которым присоединился белок HIF-1 α с различными пространственными ориентациями. На основе анализа полной энергии до и после контакта были найдены две наиболее энергетически выгодные ориентации белка на поверхности СООН-N-МУНТ. Для каждой из структур рассчитаны плотности электронных состояний (ПЭС), парциальные ПЭС для атомов, участвующих в связи СООН-N-МУНТ–белок, энергии активации, распределения зарядов и другие характеристики. С помощью метода квантовых уравнений движения получено аналитическое выражение, связывающее количество выходящего белка с разной ориентацией, гибридизацию атомных орбиталей и энергии активации белковых молекул.

Анализ результатов моделирования и расчетов показал, что при концентрации кислорода в карбоксильных группах 2,7 ат.% оптимальными для применения при доставке HIF-1 α являются СООН-N-МУНТ, поверхность которых имеет области с углами деформации кручения от 0° до 15°. В этом диапазоне формируется поверхность, обеспечивающая пролонгированный выход HIF-1 α по диффузионно-волновому механизму.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 25-22-00377, <https://rscf.ru/project/25-22-00377/>.

[1] Bartholomeusz G. *et al.* // Nano Res. 2009. V. 2. P. 279.

[2] Chudoba D. *et al.* // Int. J. Mol. Sci. 2021. V. 22. P. 12003.

[3] Tan J.M., Bullo S., Fakurazi S., Hussein M.Z. // Sci. Rep. 2020. V. 10. P. 16941.

Покрyтия на основе графена и оксида графена с инкорпорированными наночастицами металлов для создания платформ биосенсоров в КР-спектроскопии

Е.И. Серебров^{1,3}, А.В. Афанасьев¹, Е.Н. Разов², С.Н. Беляев¹, Д.В. Белов¹

¹Институт прикладной физики им. А.В. Гапонова-Грехова РАН,

ул. Ульянова д. 46, Нижний Новгород, Россия

²Институт проблем машиностроения РАН,

ул. Белинского д. 85, Нижний Новгород, Россия

³Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского,
просп. Гагарина 23, Нижний Новгород, Россия

e.serebrov@ipfran.ru

DOI: 10.26902/Graphene-25-132

Оптические биосенсоры дают возможность прямого обнаружения биомолекул в режиме реального времени. Это имеет важное значение для разработки диагностических устройств. Оптические системы обнаружения используют мощность оптического поля и элемента биологического распознавания, что позволяет проводить анализ биомолекул (биомаркеров) с высокой чувствительностью непосредственно в организме. Среди преимуществ оптических биосенсоров перед другими можно выделить их высокую специфичность, чувствительность, рентабельность и небольшие размеры.

Окисленная форма графена (оксид графена, GO) и восстановленный оксид графена (rGO), относятся к наиболее перспективным материалам для создания биосенсоров, поскольку, регулируя условия их окисления или восстановления и легирование наночастицами металлов, можно получать материалы с требуемым соотношением кислорода и углерода и определенными функциональными группами [1]. Наличие кислородсодержащих групп позволяет проводить адсорбционное и ковалентное модифицирование поверхности этих материалов как небольшими молекулами, так и крупными биомолекулами.

В нашей работе предложен и исследован способ получения покрытий на основе дисперсий GO и rGO, инкорпорированные наночастицами золота, серебра и платины. Покрyтия наносились на стеклянные, кварцевые и кремниевые подложки и исследовались методами СЭМ (Рис. 1, а), АСМ (Рис. 1, б).

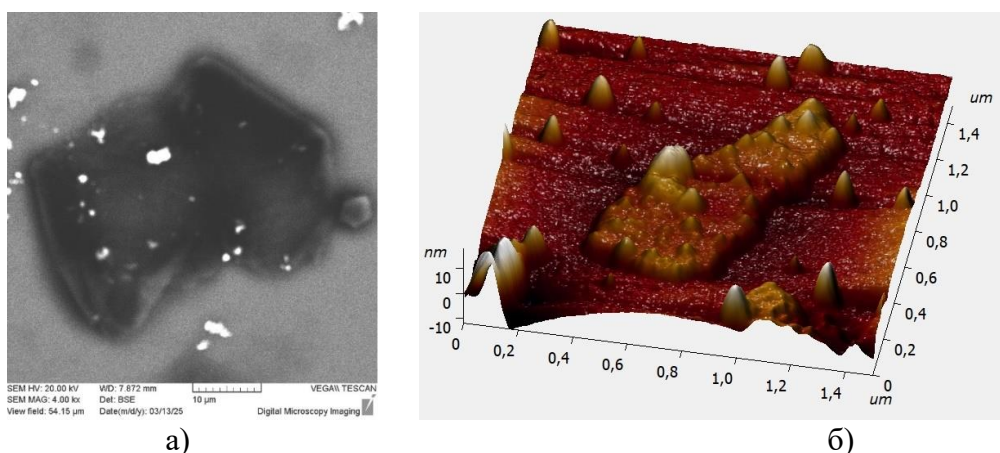


Рис. 1. СЭМ- (а) и АСМ-изображения (б) нанолнста GO с наночастицами Au.

На полученных нами подложках с покpытиями из нанолнстов GO и rGO с наночастицами металлов зарегистрирован эффект SERS. Это позволяет применять данный метод для эффективной регистрации биологических объектов (Cyt C, NADH и др.).

[1] Кулакова И.И., Лисичкин Г.В. // Вестн. Моск. ун-та. Сер. 2: Химия. 2022. Т. 63. № 6. С. 375.

Молекулярно-динамическое моделирование облучения аргоном углеродных наностенокС.А. Смирнов¹, С.А. Евлашин², Н.Д. Орехов¹¹Московский физико-технологический институт,
Институтский пер. 9 стр. 3, Долгопрудный, Россия²Сколковский институт науки и технологий,
Большой бульвар д. 30, стр. 1, Москва Россияsegakarel@icloud.com**DOI: 10.26902/Graphene-25-133**

Одним из наиболее перспективных классов материалов для электродов суперконденсаторов и батарей являются наноматериалы на основе графена [1]. Ранее предлагались различные схемы повышения каталитической активности графена, в том числе облучение высокоэнергетическими ионами благородных газов [2].

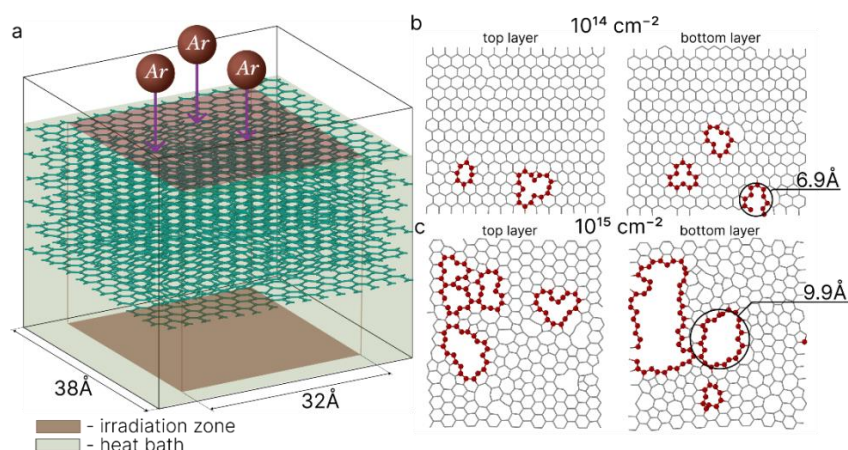


Рис. 1. Расчётная схема (a) и атомарная структура поверхности верхнего (b) и нижнего слоёв при различных дозах облучения (c).

Для описания дефектов и изменения морфологии поверхности при облучении ионами Ar^+ с энергией 40 кэВ углеродных наностенок в программном пакете LAMMPS [3] проводилось молекулярно-динамическое моделирование с помощью ReaxFF C-2013 [4]. Для ускорения процесса релаксации использовалось классическое временно-зависимое Монте-Карло [5]. Полученные результаты показывают высокую аморфизацию поверхности (Рис. 1), возникновение большого количества дефектов поверхности, а также снижение количества sp^2 -гибридизированных атомов [6]. Однако, при увеличении дозы с 10^{14} до 10^{15} cm^{-2} резко увеличивается количество и размер нанопор, что приводит к уменьшению каталитических свойств. Поэтому, доза 10^{14} cm^{-2} является оптимальной по электрохимическим свойствам. Данная работа подтверждает возможность использования облучения высокоэнергетическими ионами благородных газов углеродных наностенок с высокими электрокаталитическими свойствами. Полученные результаты также подчёркивают необходимость соблюдения баланса между увеличением электрохимических показателей и структурными изменениями поверхности.

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

[1] Bondareva J.V. *et al.* // Sci. Rep. 2025.

[2] Wang Y. *et al.* // J. Mater. Sci. 2021. V. 56. P. 173-200.

[3] Thompson A.P. *et al.* // Comput. Phys. Commun. 2022. V. 271. P. 108171.

[4] Yoon K. *et al.* // ACS Nano. 2016. V. 10. № 9. P. 8376-8384.

[5] Bal K.M. *et al.* // J. Chem. Phys. 2014. V. 141. № 20. P. 1011123.

[6] Favaro M. *et al.* // Electrochim. Acta. 2014. V. 88. P. 477.

Диаманоподобные гетероструктуры BN/графен: структура и свойства**Е.В.Суханова, Л.А. Чернозатонский, В.А. Демин***Институт биохимической физики им. Н.М. Эмануэля РАН,**ул. Косыгина 4, Москва, Россия**yekaterina.sukhanova@phystech.edu***DOI: 10.26902/Graphene-25-134**

В настоящее время проводятся активные исследования диаманов – двумерных алмазоподобных наноструктур на основе двуслойных биграфенов. Диаманы были не только теоретически предсказаны [1], но и успешно синтезированы [2]. Отдельно стоит отметить муаровые (скрученные) диаманы, в которых двумерные монослои повернуты друг относительно друга на определенный угол Θ , при этом атомы, составляющие верхнюю и нижнюю поверхности наноматериала, связаны между собой ковалентными связями [3]. Изменяя величину угла поворота Θ , можно настраивать электронные и механические свойства диаманоподобных структур [3,4].

Помимо углеродных диаманов, интерес исследователей также привлекают и гибридные диаманоподобные структуры, например, сочетающие в себе монослой графена, ковалентно соединенный с монослоем гексагонального нитрида бора (h-BN) [5]. Ранее было проведено теоретическое исследование свойств муаровых диаманоподобных гибридных структур на основе графена и гексагонального нитрида бора, две поверхности которых были функционализированы атомами фтора или водорода [5,6].

В данной работе было проведено детальное теоретическое исследование свойств диаманоподобных муаровых гибридных структур на основе графена и гексагонального нитрида бора с односторонней функционализацией. Было проведено исследование влияния концентрации легких атомов и величины угла поворота на структуру и электронные свойства рассмотренных материалов.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ (грант №24-22-00444).

[1] Chernozatonskii L.A. *et al.* // JETP Lett. 2009. V. 90. P. 134.

[2] Piazza F. *et al.* // Carbon. 2020. V. 169. P. 129.

[3] Chernozatonskii L.A., Demin V.A., Kvashnin D.G. // Appl. Phys. Lett. 2020. V. 117. № 25. P. 253104.

[4] Artyukh A.A., Chernozatonskii L.A. // JETP Lett. 2022. V. 116. № 10. P. 737-744.

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

[6] Barboza A.P.M. *et al.* // Carbon. 2019. V. 155. P. 108-113.

Eremeev S.V.....	61	Калганова А.О.....	82
Тран Т.-Н.	98	Каплун М.В.	83
Алексеев А.А.....	115	Катков В.Л.	42
Алексеев В.А.....	71	Качоровский В.Ю.	33, 34
Алексеев Н.И.....	29	Ковальчук Н.Г.	111
Ананьина А.А.....	72	Комаров И.А.....	45
Андрющенко В.А.....	65, 101	Кондранова А.М.	85, 104, 106
Аникина Е.В.	83, 102	Красников Д.В.....	7, 21, 100
Антонова И.В. ..	16, 41, 48, 74, 92, 131, 132	Крылова К.А.....	53, 133
Ахунова А.Х.....	103	Крючков Т.Д.....	128
Баимова Ю.А.....	35, 53, 93, 103, 133	Кудрявцева А.С.....	84
Баннов А.Г.....	17, 73, 75	Кузнецов В.А.	31, 80, 97
Баскакова К. И.....	104	Кузнецов В.Л.	9, 30, 49, 87, 97
Батраков К.Г.....	15, 44	Курбатова В.Д.	11, 127
Бетке И.А.....	121	Куркина И.И.....	50
Бобенко Н.Г.....	64, 135	Лаврухина С.А.	22, 112
Богомолова А.И.	73	Ларионов К.В.	55
Боев М.В.	105	Липовка А.А.....	26
Бондарева Ю.В.....	66	Максимов Ф.М.	78, 86
Бородина О.А.	122	Мальцева Н.В.	87
Брусско В.В.	46	Мацко Н.Л.	51
Бузмакова А.А.....	41, 74	Милёхин А.Г.	12
Булусhev Д.А.....	39, 90, 128	Михеев И.В.....	47, 94, 99
Бурмистров И.С.	34	Мосеев С.И.....	9, 30, 49, 87, 97
Варламова Л.А.	116, 123	Насибулин	7
Вершинина А.И.....	23	Насибулин А.Г.	21, 78, 86, 100
Винокуров П.В.....	70	Нефедова А.Ю.....	129
Возняковский А.А.	18	Новиков М.А.....	130
Волынец Н.И.....	15, 43, 44	Нуриахметов З.Н.....	88
Герасева Т.А.....	22, 124	Образцов А.Н.	5
Головахин В.В.....	75	Орехов Н.Д.	38, 54
Городецкий Д.В.	43, 85, 106, 117	Орешко И.В.	29, 89
Гребёнкина М.А.....	76	Пальянов Ю.Н.	27
Гурова О.А.	107	Панфилова А.Д.	57, 90
Данилин В.А.....	77	Петрова С.С.....	91
Демин В.А.	77, 108, 138	Петякин Н.В.	92
Димиев А.М.....	37, 46	Подъячева О.Ю.....	8, 129
Дмитриев А.В.....	109	Полякова П.В.	93
Дозморов С.А.....	78, 86	Попов А.М.....	60
Дураков Д.Е.....	79	Попов З.И.	40, 91
Евлашин С.А.....	38, 66, 68, 137	Попов К.М.	113, 130
Ельсукова С.Н.....	125	Пулик А.А.....	131
Еняшин А.Н.....	110	Растяпин Я.И.....	132
Ермаков В.А.	80	Ратова Д.-М.В.....	47, 94
Ерохин С.В.	52, 55, 123	Резванова А.Е.....	95
Заворин А.В.....	9, 30, 49, 87	Рожнова Е.А.	35, 133
Загузина А.А.	57, 81, 126	Рыбин Д.К.....	19
Зонов Р.Г.....	20	Сайгареев Р.А.....	134
Иванов А.И.....	16, 41, 48, 74, 92, 131, 132	Сапежинская Т.А.	135
Иони Ю.В.....	24	Сапрыкин А.И.....	11
Ионов А.Н.	67	Седельникова О.В.....	43, 104, 106, 117

Семушкина Г.И.	22, 114
Серебров Е.И.	136
Смагулова С.А.	10, 70, 115
Смирнов С.А.	137
Смовж Д.В.	62, 73, 88, 96
Созыкин С.А.	58
Сорокин Д.В.	96
Сорокин П.Б.	28, 52, 55, 116
Сорокина Л.Ю.	116
Суханова Е.В.	138
Сысоев В.И.	22, 43, 112, 113, 124, 130
Тарасенко С.А.	6
Ткаченко В.А.	69
Уваров Н.Ф.	56
Федоренко А.Д.	15, 112, 117, 118, 126

Федоров А.А.	97
Федоров И.А.	63
Федосеева Ю.В.	15, 22, 57, 90, 106, 114, 117, 125
Цыбуля С.В.	14
Чермашенцев Г.Р.	99
Чернодубов Д.А.	38, 68
Чернозатонский Л.А.	32, 77, 108, 138
Чесноков В.В.	25
Шабиева А.В.	119
Шавелкина М.Б.	16, 41, 53
Шадров С.П.	7, 100
Шикин А.М.	13
Шунаев В.В.	59, 64, 120, 135

Научное издание

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

Сборник тезисов докладов

11–15 августа 2025 года

Ответственный за выпуск
д.ф.-м.н., проф. ОКОТРУБ Александр Владимирович

Техническое редактирование и верстка
Небогатикова Н.А., Ворфоломеева А.А.,
Седельникова О.В., Федосеева Ю.В., Миронова Г.Н.

Подписано к печати и в свет 24.07.2025.
Формат 60×84/8.
Гарнитура «Times New Roman». Печ. л. 16,74. Уч.-изд. л. 12,73.

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки
Институт неорганической химии им. А.В. Николаева Сибирского отделения РАН.
Просп. Акад. Лаврентьева, 3, Новосибирск, 630090.