

Грант РФФ 25-72-31032

Тезисы докладов

Первая
Балтийская
Школа

НУМ 2025
7-12 ноября

Получение и применение
мезо- и нано-
структурированных
функциональных
углеродных
материалов

БФУ
ИМЕНИ И. КАНТА

г. Калининград, 2025

СБОРНИК ТЕЗИСОВ

**Первая Балтийская Школа по наноуглеродным
материалам
(ПБШ «НУМ-2025»)**

7-12 ноября 2025

БФУ им. И. Канта, Калининград

Редакционная коллегия:

Свирко Ю.П., Образцов А.Н., Савин В., Куприянова Г.С., Моргунов Р.Б.

Первая Балтийская Школа по наноуглеродным материалам (ПБШ «НУМ-2025»): Сборник тезисов

Сборник содержит тезисы пленарных, приглашенных, устных, постерных и докладов молодых ученых Первой Балтийской Школы по наноуглеродным материалам (ПБШ «НУМ-2025») по теме: «Получение и применения мезо- и нано-структурированных функциональных углеродных материалов»

Тезисы представлены в авторской редакции

**КОММЕРЧЕСКИЕ МНОГОСТЕННЫЕ УГЛЕРОДНЫЕ НАНОТРУБКИ:
СРАВНИТЕЛЬНОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ****В. Л. Кузнецов¹**¹Институт катализа СО РАН, Новосибирск
kuznet@catalysis.ru

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. 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 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 УНТ появилось в 2007-2008 гг. (Bayer Material Science, Nanocyl, Archema,). К 2014 году мировое производство достигло 3500 тонн, что в основном определялось уровнем их потребления. Сразу же выяснилось, что потребительские свойства УНТ в значительной степени зависят от множества параметров, таких как: распределение по диаметру, дефектность, морфология первичных продуктов. Особое внимание было уделено 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.

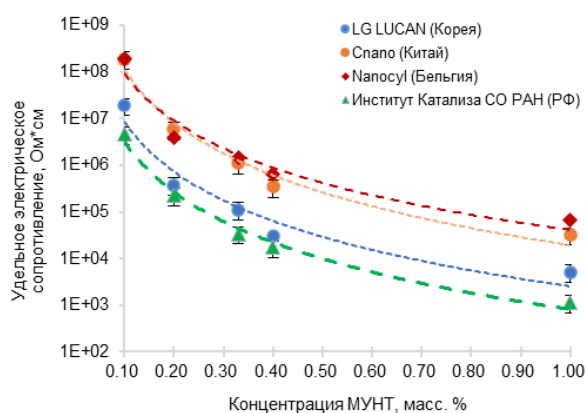
На, структуру, морфологию и качество УНТ, их однородность и чистоту существенно влияют технологические параметры их производства, такие как размер и состав частиц катализатора, условия его активации, природа углеродного сырья, температура, газовые потоки, конструкция реактора и др.

В докладе представлены сравнительные характеристики репрезентативного набора коммерческих МУНТ, производимых рядом ведущих компаний, и МУНТ, получаемых в Институте катализа СО РАН. В качестве методов контроля и охарактеризования нанотрубок были использованы просвечивающая электронная микроскопия (ПЭМ) в сочетании с энергодисперсионной спектроскопией (ЭДС), растровая электронная микроскопия (РЭМ), рентгенофазовый анализ (РФА), спектроскопия комбинационного рассеяния (СКР), низкотемпературная адсорбция азота (НАА), гелиевой пикнометрии и др.

Данный набор методов позволяет получить исчерпывающую информацию о строении МУНТ. В частности, ПЭМ (ЭДС) была использована для изучения распределения нанотрубок по диаметру, оценки их дефектности и наличия примесей катализатора; РЭМ была использована для получения информации о морфологии агломератов МУНТ и примесей катализатора; метод РФА - для оценки средних значений межслоевого расстояния в стенках нанотрубок и их средней толщины; СКР – для получения сведения о дефектности нанотрубок; НАА – для определения удельной поверхности и пористой структуры УНТ.

В докладе будут представлены сравнительные характеристики некоторых композиционных материалов, полученных с использованием коммерческих МУНТ, в том числе с использованием нанотрубок Института катализа СО РАН. Установлено, что для ряда приложений МУНТ производства ИК СО РАН превосходят зарубежные аналоги. В качестве примера на Рис. 1 приведены результаты сравнения электропроводящих свойств

покрытий на основе эпоксидного связующего с МУНТ производства LG Chem, CNano, Nanosyl и ИК СО РАН. Можно видеть, что с использованием МУНТ производства ИК СО РАН высокая проводимость достигается при существенно более низких содержаниях МУНТ в композите.



Образец эпоксидного покрытия с МУНТ



Рис.1. Сравнение электропроводящих свойств покрытий на основе эпоксидного связующего с МУНТ производства LG Chem, CNano, Nanosyl и ИК СО РАН

Одним из перспективных применений МУНТ является модификация резиновых компаундов для производства шин. При введении МУНТ в состав резины углеродные нанотрубки образуют армирующий и электропроводящий каркас в полимерной матрице. На Рис. 2 приведены эффекты использования МУНТ на физико-механические свойства резины на основе SBR. Можно видеть, что с использованием МУНТ значительно вырастает сопротивление раздиру и условная прочность при 100 и 200% удлинении. Подобный рост показателей также отражается в улучшении таких эксплуатационных характеристик шин, как износостойкость, сцепление с сухой и мокрой дорогой. Авторами была разработана универсальная добавка для шин и РТИ – концентрат МУНТ совместимый с резинами на основе SBR, NR и BR.



Рис.2 Влияние МУНТ на физико-механических свойств резин на основе SBR. Концентрат на основе МУНТ производства ИК СО РАН.

Будут представлены примеры влияния параметров используемых МУНТ на свойства различных композиционных материалов, а также аспекты разработки концентратов (мастербатчей, суспензий и эмульсий), используемых для введения МУНТ в различные полимерные и неорганические матрицы.

Работа выполнена в рамках проекта «Создание опытной технологической линии для производства катализаторов и многостенных углеродных нанотрубок (мунт) и разработка модифицированных материалов с применением углеродных наноаддитивов»

ИЗУЧЕНИЕ ОСОБЕННОСТЕЙ ФОРМИРОВАНИЯ СВИТКООБРАЗНЫХ УГЛЕРОДНЫХ НАНОСТРУКТУР В РАМКАХ МОЛЕКУЛЯРНО-МЕХАНИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ

Е. А. Кулакова^{1,2}

¹Челябинский государственный университет, Россия, Челябинск

²Балтийский федеральный университет им. Иммануила Канта, Россия, Калининград
lelya.kulakova.2003@yandex.ru

Углеродные наносвитки, подобно углеродным нанотрубкам, обладают высокой электро- и теплопроводностью, а также хорошими механическими свойствами, поэтому могут применяться в области изготовления литий-ионных батарей, суперконденсаторов и датчиков. Однако структура таких наносвитков еще не до конца изучена. В частности, не установлены причины формирования свиткообразной структуры и появления огранки в ней. Поэтому данная работа посвящена теоретическому исследованию формирования углеродных наносвитков на поверхности алмаза.

Расчеты были произведены в рамках молекулярно-механического метода MM2, поскольку данный метод позволяет рассчитывать структуры размерами до 10 тысяч атомов. Кроме того, параметры алмаза и графита, рассчитанные данным методом, хорошо согласуются с параметрами, установленными экспериментальным путем.

В результате исследования были смоделированы такие структуры, как наносвитки с ядром из наноалмаза (рис. 1а), размеры которых в пределе достигали 33 Å в диаметре, и углеродные свитки на поверхности алмаза, внешний диаметр которых не превышал 31 Å (рис. 1б). При изучении модели наносвитка с ядром из наноалмаза установлено следующее: 1) для оборота графеновой ленты вокруг наноалмаза на начальном этапе формирования необходимо применить внешнее механическое воздействие; 2) имеется вероятность замыкания графеновой ленты на плоскости алмаза (100) по той причине, что именно на этой плоскости присутствует максимальное число разорванных С-С связей. В случае формирования наносвитка на поверхности алмаза были выделены следующие особенности: 1) формирование свитка на поверхности алмаза возможно за счет присоединения к ней спиралевидного ониона (рис. 1б); 2) на плоскости алмаза (111) возможно формирование только 6-угольной конфигурации углеродного наносвитка, а на плоскости (100) – 4-угольной конфигурации. Для обеих рассмотренных моделей наличие огранки в графеноподобных свиткообразных структурах не наблюдается.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 25-72-31032 (<https://rscf.ru/project/25-72-31032>).

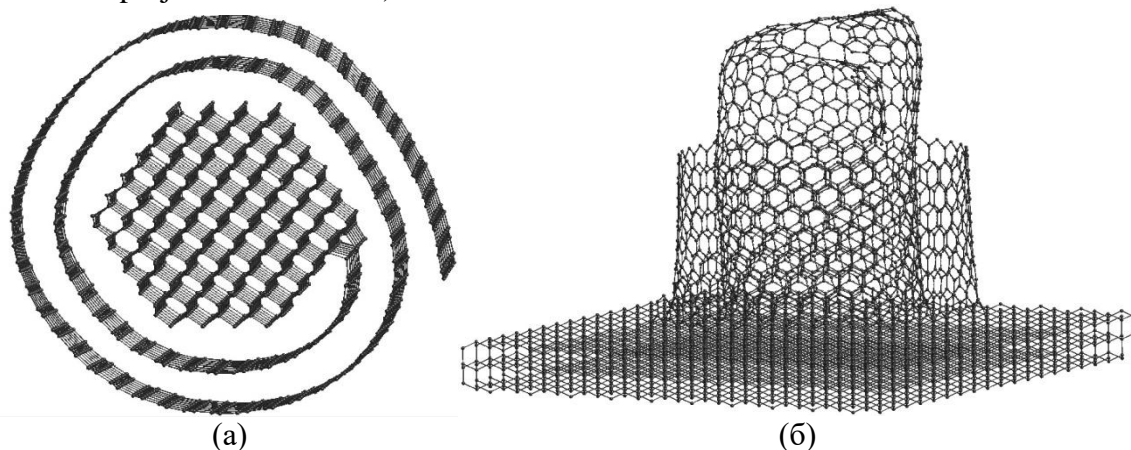


Рис. 1. Примеры структур углеродных наносвитков с ядром из наноалмаза (а) и связанного с поверхностью алмаза (б).

МАГНИТНЫЕ СВОЙСТВА ГРАФЕНА И ГРАФЕНОПОДОБНЫХ 2D МАТЕРИАЛОВ

Р.Б. Моргунов^{1,2,3}

¹Федеральный исследовательский центр проблем химической физики и медицинской химии РАН, Россия, Черноголовка

²ФГАОУВО Балтийский Федеральный Университет им. И. Канта, Россия, Калининград

³Российский квантовый центр, Россия, Сколково, Москва

Графен дал старт новому классу двумерных материалов с уникальными электронными и магнитными свойствами. В лекции будут сначала обсуждены магнитные свойства графена, которые связаны, как правило, с наличием дефектов, приводящих к оборванным углеродным связям, либо примесей с неспаренными спинами. Будет показано, что графен проявляет самые различные состояния от диамагнитных (бездефектный графен), до парамагнитных и ферромагнитных. Будет рассмотрена взаимосвязь между магнитной подрешеткой графена и поведением носителей заряда. Намагниченность графена влияет на рассеяние носителей и магнитосопротивление тонких слоев. Впоследствии стало понятно, что существует широкий класс, так называемых ван-дер-Ваальсовых двумерных соединений, которые представляют собой слабо связанные двумерные слои атомов, обладающие двумерной спецификой магнетизма и зонной структуры.

Во второй части лекции будут представлен миниобзор для графеноподобных без углеродных 2D материалов, содержащих в кристаллической решетке атомы переходных металлов и проявляющих упорядочение спинов разных типов. Планируется рассмотреть практические применения однослойных магнитных структур в спинтронике.

В третьей части лекции будут представлены оригинальные результаты, полученные нашей группой для монокристаллов и тонких (20 Å) флейков соединений CrSBr, CrCl₃, для которых нами были получены новые данные и выводы об их оптических, магнитных и механических свойствах. В частности, будет рассмотрена эксфолиация атомарных слоев в процессе наноиндентирования, определение упругих модулей и энергии ван-дер-Ваальсовой связи слоев для тонких образцов. Кроме того, будут рассмотрены магнитные релаксационные свойства этих соединений и их связь с электронной подсистемой. Полученные результаты позволяют судить о динамике доменов и нуклеации зародышей намагниченности, а также развивать простые и изящные методы обнаружения сложных спиновых состояний и переходов, связанных с замораживанием спинов. Кроме того, будет подробно обсуждено влияние стехиометрии на магнетизм CrSBr.

В заключение будет приведен анализ совокупности графеноподобных материалов, сходства и различий их свойств.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 25-72-31032, <https://rscf.ru/project/25-72-31032/>

МАТЕРИАЛОВЕДЧЕСКИЕ ОСНОВЫ СОЗДАНИЯ ЭЛЕКТРОПРОВОДЯЩИХ КОМПОЗИТНЫХ ВОЛОКОН С УГЛЕРОДНЫМИ НАНОСТРУКТУРАМИ**О.А.Молоканова¹**

Балтийский федеральный университет им. И. Канта, Россия, Калининград,
omoskaliuk1@kantiana.ru

Одним из приоритетных направлений применений полимерных композитов является создание на их основе волокон и нитей с заданным (регулируемым) уровнем свойств. Волокна и нити, полученные на основе электропроводящих композитов, используются при производстве тканей для спец.одежды и СИЗ (защита от статического электричества, электромагнитных полей и пониженных температур в условиях Арктики и Крайнего Севера), изготовления гибких греющих элементов для приборостроения, автомобильной и авиационной промышленности, агрохозяйства.

Цель данной работы - систематизировать и обобщить результаты научных исследований в области создания композитных волокон и нитей с заданным уровнем физико-механических и специальных свойств на основе полипропиленовой и дисперсных углеродных наноструктур различной химической природы, формы и размеров.

В работе выявлены закономерности изменения электропроводящих и механических свойств композитных волокон и плоских нитей, полученных на основе полипропиленовой матрицы, в зависимости от типа, формы и концентрации углеродных наноструктур, степени ориентационной вытяжки композитов. Показано, что с увеличением осевого отношения углеродных наночастиц порог протекания электрического тока смещается в сторону меньших концентраций. Так же выявлено, что форма композитной нити и волокна оказывает влияние на формирование проводящего кластера. Создание электропроводящих композитных нитей возможно при более низких концентрациях, чем в случае экструзии плоских нитей (прямоугольного сечения). Показано, что введение смесового наполнителя позволяет сохранить электропроводность композитных волокон и нитей на исходном уровне при ориентационной вытяжке. Установлено, что ориентационная вытяжка в случае наполнения моно углеродными наноструктурами снижает электропроводность композитных волокон и плоских нитей, что вызвано разрывом проводящих цепочек в направлении вытяжки и не возможностью образования новых проводящих контактов, в то время как в случае наполнения смесовым наполнителем (смесь из сферических и анизометрических наночастиц) электропроводность композитных нитей и волокон сохраняется на исходном уровне. Показано, что наиболее высокие деформационно-прочностные характеристики композитных волокон и нитей, на основе полипропиленовой матрицы характерны при малом наполнении (до нескольких процентов) анизометричных частиц.

Таким образом показано, что на основе полипропиленовой матрицы, наполненной углеродными наноструктурами различной формы, возможно создание композитных волокон и нитей, обладающих уровнем электропроводности достаточной для их применения при создании антистатического текстиля (спец.одежда и СИЗ), упаковочных материалов, биг-бэгов для транспортировки взрывоопасных грузов. При введении смесового углеродного наполнителя возможно создание высокоориентированных композитных волокон и нитей, с высокопроводящими свойствами. Такие материалы подходят для создания тканей, используемых при производстве гибких греющих элементов, в том числе для обогрева конструкций, сооружений и персонала в экстремальных условиях Арктики и Крайнего Севера.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Российского научного фонда, грант № 25-72-31032 (<https://rscf.ru/project/25-72-31032>).

ЭЛЕКТРОПРОВОДЯЩИЕ КОМПОЗИТНЫЕ ВОЛОКНА С УГЛЕРОДНЫМИ НАНОСТРУКТУРАМИ. СОЗДАНИЕ ТЕХНОЛОГИИ И ЗАПУСК ПРОИЗВОДСТВА

И.А.Копп¹

¹ООО «Ампертекс», Россия, Калининград,
info@amperetex.ru

Ампертекс - небольшая частная компания, которая 6 лет развивает технологии электропроводимости в полимерных материалах и на сегодняшний день является единственным владельцем и держателем патентов технологии производства проводящих полимерных нитей.

Основой продукции компании является композитное волокно, состоящее из различных полимеров (ПП, ПА6 и ПЭ) и углеродных концентратов (CNT) с широким диапазоном показателя электрического сопротивления, что позволяет создавать сверхтонкие и энергоэффективные нагревательные поверхности для широких диапазонов напряжения – от 5 до 220 В. Мы производим композитную нить в диапазоне от 15 кОм до 10 мОм.

Основные продукты — это инновационные композитные материалы нового поколения, обладающие функциями нагрева, антистатика и экранирования, и значительно превосходящие уже существующие аналоги.

Основные преимущества композитного волокна АМПЕРТЕКС:

- российское сырье
- нить производится в процессе экструзии и тщательного смешивания компонентов, а не нанесения покрытия, как в продуктах аналогах, исключая осыпание токопроводящей матрицы
- высокая устойчивость к механическому воздействию и стабильность сопротивления, по результатам испытания более 2000 циклов на истирание
- равномерный нагрев, широкий диапазон по показателю сопротивление в зависимости от конечного назначения.

На основе технологии АМПЕРТЕКС производится нагревательная сетка и ткань, которая может быть интегрирована в любой материал и выполнять функцию не только энергоэффективного нагрева, но и армирования.

Сферы применения:

- БПЛА и авиастроение;
- Автомобилестроение;
- Легкая промышленность
- Строительство и ЖКХ: антиобледенительные системы и т.д.;
- Транспортная инфраструктура;
- Электроника и телекоммуникации;

Основные проблемы и вопросы в ходе разработки технологии:

- Разработка технологии и взаимодействие с НИИ, ВУЗами и институтами развития;
- Авторское право;
- Патентование;
- Масштабирование технологии;
- Сотрудничество с инжиниринговыми центрами и профильными лабораториями.

В ходе доклада обо всех проблемах и вопросах будет рассказано подробнее с иллюстрированием примерами из истории компании и кейсами по их решению.

ВЛИЯНИЕ ПОВЕРХНОСТНЫХ СОСТОЯНИЙ ДАТЧИКА ИЗ АЛМАЗНОЙ ПЛЕНКИ И ГРАФИТОВЫХ ЭЛЕКТРОДОВ НА ЕГО ФОТООТКЛИК НА РЕНТГЕНОВСКОЕ ИЗЛУЧЕНИЕ

**Ю.В. Федосеева¹, Д.В. Городецкий, Л.Г. Булушева¹, А.В. Окотруб¹,
О.В. Седельникова¹**

¹Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт неорганической химии им. А.В. Николаева СО РАН, Новосибирск, fedoseeva@niic.nsc.ru

Рентгеновские лучи нашли широкое применение в различных сферах: от медицинской визуализации до промышленной дефектоскопии, анализа кристаллической структуры и проверки безопасности. Однако эффективность их использования в этих областях напрямую зависит от качества рентгеновских детекторов. В связи с этим существует острая необходимость в создании высокочувствительных и быстродействующих детекторов рентгеновского излучения, которые должны обладать высокой радиационной стойкостью и способностью работать при высоких температурах. Алмаз обладает уникальными свойствами, такими как широкая запрещённая зона, высокая подвижность электронов и дырок, короткий срок жизни носителей заряда и невероятная устойчивость к воздействию агрессивных сред. Благодаря данным свойствам алмаз является подходящим материалом для изготовления устройств обнаружения рентгеновского излучения.

В данной работе детекторы изготавливались из свободных поликристаллических алмазных пленок, полученных методом плазмо-стимулированного химического осаждения (PE CVD) из смеси водорода и пентана при активации микроволновым разрядом. При облучении поверхности алмазной пленки мощным импульсным ультрафиолетовым лазером на воздухе происходит травление поверхности алмазной пленки с образованием каналов, покрытых низкоразмерным графитоподобным слоем высокой электропроводности. Продемонстрирована возможность изготовления на поверхности алмазных пленок встречных параллельных графитовых электродов с целью изготовления датчика рентгеновского излучения. Морфология, состав и электронного строения алмазных пленок и графитоподобных электродов изучались методами сканирующей электронной микроскопии, рамановской спектроскопии и рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии. На графитоподобные электроды на поверхности алмазной пленки подавалось постоянное напряжение от 3 до 300 В в зависимости от проводимости датчика и регистрировался ток, протекающий через тонкий слой алмазной пленки. Принцип обнаружения излучения в алмазе основан на создании электронно-дырочных пар внутри алмаза в результате взаимодействия фотонов, которые необходимо обнаружить. Локальное смещение этих носителей, вызванное электрическим полем в материале, вызывает переходный сигнал на электродах устройства. Проведена регистрация фотоэлектрических откликов датчиков по отношению к рентгеновскому излучению, генерируемому рентгеновской трубкой с медным анодом в режиме ускоряющих напряжений от 0 до 8 кВ. С ростом энергии фотонов наблюдалось увеличение тока, протекающего через алмаз при заданном постоянном напряжении. Термическая обработка датчика в восстановительной атмосфере аммиака или водорода привела к увеличению фототклика на рентгеновское излучение и работе датчика при меньших напряжениях, что было связано с упорядочением структуры графитовых электродов и удалением кислородсодержащих групп с поверхности датчика.

Работа была выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проект № 22-72-10097-П).

ОБЩИЕ ПРИНЦИПЫ И ПРАКТИЧЕСКИЕ МЕТОДЫ ПОЛУЧЕНИЯ УГЛЕРОДНЫХ ПЛЕНОК ПЛАЗМО-ХИМИЧЕСКИМ ОСАЖДЕНИЕМ

А.Н. Образцов^{1,2}

¹МГУ имени М.В. Ломоносова, Физический факультет, Россия, Москва

²Балтийский федеральный университет им. И. Канта, Россия, Калининград

Для разнообразных практических применений требуются углеродные материалы в виде тонких пленок и покрытий, одним из способов получения которых служит осаждение из углерод-содержащей газовой среды. Характеристики получаемых материалов, в том числе, их аморфная или упорядоченная (кристаллическая) структура (алмазного или графено-подобного типа) определяются различными параметрами, включая температуру и тип подложки, состав и давление газовой среды, а также степень ее активации, и др. Использование газоразрядной плазмы относится к одному из самых распространенных способов активации благодаря удобству его технической реализации и обеспечению контроля за технологическими параметрами. В качестве одного из вариантов создания такой активации может использоваться разряд постоянного тока в смеси водорода и метана. Этот метод продемонстрировал возможность получения с его помощью тонкопленочных покрытий из углеродных материалов с различными структурно-морфологическими характеристиками, включая такие, как алмазные иглоподобные кристаллиты, моно- и много-слойный графен, массивы углеродных нанотрубок, мезопористые слои из углеродных наностенок и др. Универсальность и относительная техническая простота реализации плазмо-химического осаждения с помощью активации газовой смеси разрядом постоянного тока делает этот метод привлекательным для решения широкого круга исследовательских задач. Однако использование этой технологии в прикладных разработках требует совершенствования используемого оборудования для обеспечения необходимого масштабирования производства, воспроизводимости параметров углеродных пленочных материалов и обеспечения их заданных характеристик. В том числе отдельные узлы и система в целом должны быть доработаны для обеспечения независимого от газового разряда контроля за температурой подложки, контроля за составом и степенью активации газовой среды, обеспечения непрерывной работы в течение длительного периода времени и др. В докладе обсуждаются научно-технические проблемы, связанные с такими доработками, и возможные пути решения соответствующих проблем.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Российского научного фонда, грант № 25-72-31032 (<https://rscf.ru/project/25-72-31032>).

ТЕОРЕТИЧЕСКИЙ ПОИСК НОВЫХ АЛМАЗОПОДОБНЫХ СОЕДИНЕНИЙ

В.А. Грешняков^{1,2}

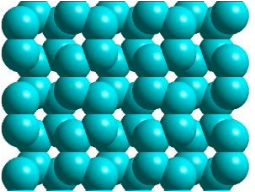
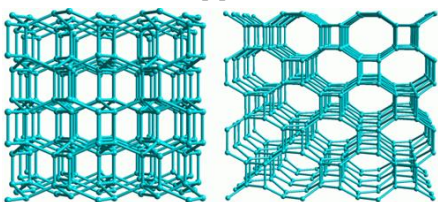
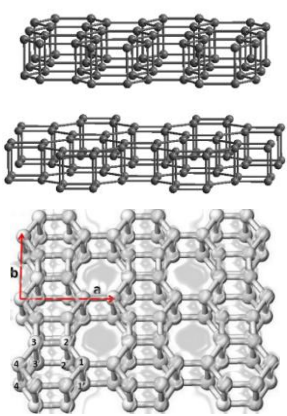
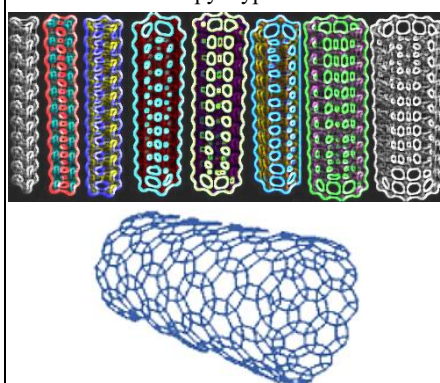
¹Челябинский государственный университет, Россия, Челябинск

²Балтийский федеральный университет им. И. Канта, Россия, Калининград
v.greshnyakov@yandex.ru

Особенности структуры алмаза и алмазоподобных материалов обуславливают их превосходные механические и антикоррозионные характеристики, высокую теплопроводность, уникальные оптические и электронные свойства. По этой причине алмазоподобные материалы находят широкое практическое применение в установках для создания высоких давлений, в абразивной и ювелирной промышленности, оптике, электронике и биомедицине. Кроме алмаза, к настоящему времени синтезирован ряд политипных и полиморфных разновидностей алмаза (ПКФ C_{24} , гексагональный алмаз, фаза высокой плотности C_8 , T -углерод и т.д.), называемых алмазоподобными фазами. Однако установить возможное число таких фаз и диапазон изменения их свойств экспериментальными методами крайне затруднительно, поэтому для эффективного решения этой проблемы активно применяются методы компьютерного моделирования.

Установлено, что полиморфы алмаза (таблица 1) могут иметь плотность, изменяющуюся в пределах от 1.21 до 3.67 г/см³, высокие значения твердости (49-94 ГПа), объемного модуля (141-450 ГПа), модуля Юнга (~200-1190 ГПа) и модуля сдвига (70-530 ГПа), а также могут проявлять себя не только как диэлектрики, но и как полупроводники. Некоторые из этих фаз при растягивающих нагрузках могут быть ауксетиками. Большой интерес представляют не только свойства алмазоподобных фаз, но и то, что они могут быть получены при сжатии наноструктур-предшественников (графеновых слоев, углеродных нанотрубок, фуллеренов). Поэтому исследование алмазоподобных фаз касается также актуальной темы изучения наноструктур и их практического использования при синтезе наноструктурированных алмазоподобных материалов.

Таблица 1. Классификация углеродных алмазоподобных фаз и наноструктур по пространственной протяженности

3D	2D	1D
<p>Политипы алмаза</p>  <p>Полиморфы алмаза</p> 	<p>Алмазоподобные бислои</p> 	<p>Призматические трубки и нанотрубкулярные супракристаллические структуры</p> 

Кроме того, недавние теоретические исследования показали, что возможно существование ряда напряженных слоевых и трубчатых наноструктур (см. таблицу 1), состоящих только из 4-координированных (sp^3 -гибридизированных) атомов углерода, которые могут быть полупроводниками или проводниками.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 25-72-31032 (<https://rscf.ru/project/25-72-31032>).

ЭМИССИЯ ЭЛЕКТРОНОВ ИЗ УГЛЕРОДНЫХ НАНОСТРУКТУР

В. И. Клещ^{1,2}

¹Физический факультет, Московский государственный университет
им. М.В. Ломоносова, Москва

²Лаборатория физического материаловедения, Балтийский федеральный университет им.
И. Канта, Калининград

В докладе будут представлены результаты исследования автоэлектронной эмиссии, фотоиндуцированных и электромеханических эффектов, наблюдаемых для холодных катодов на основе широкого спектра углеродных материалов, включая графен, углеродные нанотрубки, нанографитные пленки и алмаз. Будут рассмотрены общие сведения об автоэлектронной эмиссии и специфические особенности этого явления для углеродных наноструктур. В частности, будут представлены результаты исследования эффектов, обусловленных влиянием кулоновской блокады и резонансного туннелирования, которые наблюдались при автоэлектронной эмиссии из наноразмерных углеродных катодов, а также эффекта возбуждения электромеханических автоколебаний в системах, содержащих холодные катоды, обладающие свойствами гибкости и упругости. Также будут представлены результаты исследований, направленных на практическое применение углеродных материалов в электровакуумных устройствах, включая катодолюминесцентные лампы, рентгеновские трубки и электронные пушки для космических аппаратов.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 25-72-31032, <https://rscf.ru/project/25-72-31032/>

СРАВНИТЕЛЬНЫЙ АНАЛИЗ МЕТОДА ХЮККЕЛЯ И DFT РАСЧЕТА СОСТОЯНИЙ УГЛЕРОДНЫХ СТРУКТУР

Г.С.Куприянова¹, М.Л.Смирнов¹, В.В.Савин¹,

¹Балтийский федеральный университет им. И. Канта, Россия, Калининград
gkupriyanova@kantiana.ru

Одной из центральных задач современного материаловедения является установление количественных корреляций между атомной структурой и электронными свойствами материалов, что позволяет целенаправленно проектировать системы с заданными функциональными характеристиками.

В контексте двумерных углеродных материалов ключевую роль играет π -электронная система, определяющая как электронные, так и топологические свойства. Метод Хюккеля, несмотря на свою простоту, эффективно описывает π -электронную структуру плоских углеродных систем благодаря ортогональности σ - и π -орбиталей.

Он качественно воспроизводит краевые состояния, правила ароматичности и топологические особенности. В то же время методы теории функционала плотности (DFT) обеспечивают значительно более точное описание электронной структуры. Однако их вычислительная сложность ограничивает применимость к большим системам.

В данной работе проведён систематический сравнительный анализ результатов, полученных с использованием метода Хюккеля и DFT (в рамках функционалов PBE и HSE06), для ряда модельных углеродных структур — от графеновых нанолент до дефектных нанотрубок.

Целью является построение параметризованной версии полуэмпирического метода Хюккеля, калиброванной по данным DFT, что позволит использовать его для быстрого предсказания электронных и топологических свойств новых углеродных материалов. Для автоматизации анализа, генерации кода численных решений и выявления скрытых корреляций между π -электронной плотностью, химическими сдвигами ^{13}C ЯМР и топологическими инвариантами были применены современные ИИ-системы: QwQ-32B, DeepThink и GigaChat. В работе обсуждаются достоинства и недостатки ИИ при их использовании.

Работа выполнена за счет гранта Российского научного фонда № 25-72-31032 (<https://rscf.ru/project/25-72-31032>).

СИНТЕЗ И ХИМИЧЕСКАЯ МОДИФИКАЦИЯ МЕЗОПОРИСТЫХ УГЛЕРОДНЫХ МАТЕРИАЛОВ ДЛЯ ПРИМЕНЕНИЯ В КАЧЕСТВЕ ЭЛЕКТРОДОВ АККУМУЛЯТОРОВ И КОНДЕНСАТОРОВ

Ю.В. Федосеева¹, Е.В. Лисица¹, А.А. Ворфоломеева¹, А.Д. Панфилова¹, Л.Г. Булушева¹, А.В. Окотруб¹

¹Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт неорганической химии им. А.В. Николаева СО РАН, Новосибирск, fedoseeva@niic.nsc.ru

Для развития электротранспорта необходимо разработать новые энергоемкие, мощные и дешевые устройства накопления электрической энергии, способные работать длительное время в условиях холодного климата. Одним из главных требований к электрохимическим устройствам, аккумуляторам и конденсаторам, является их надёжная работа в условиях холодного климата. Для решения этой задачи необходимо разработать емкие и стабильно работающие электродные материалы. Нанопористые углеродные материалы представляют собой трехмерные прочные каркасы, состоящие из тонких графеноподобных слоев. Они обладают уникальной пористой структурой, развитой поверхностью, высокой химической и термической стабильностью, а также хорошей электрической проводимостью. Благодаря данным свойствам пористые углеродные материалы вызывают большой практический интерес для их применения в качестве материалов электродов в суперконденсаторах, включая гибридные, и анодов в литий- и натрий-ионных аккумуляторах.

В данной работе для получения пористых углеродных материалов применялся темплатный метод химического осаждения из газовой фазы. Пористая структура полученного углеродного материала определялась размером и составом темплатных наночастиц. Эти параметры можно контролировать, выбирая состав прекурсора темплатных частиц и параметров термолиза. В данной работе использовались соли кальция и железа карбоновых кислот. А использование разных источников углерода, таких как этанол, толуол и ацетонитрил, позволяет изменять состав и структуру углеродного материала. Были получены материалы с удельной площадью поверхности в диапазоне 150–900 м²/г. Удельная площадь поверхности и химический состав поверхности углеродного материала оказывают определяющее влияние на адсорбционные характеристики и поверхностные электрохимические реакции.

Были разработаны новые методики химической модификации пористого углеродного материала, а именно азотирование, бромирование и хлорирование. В работе особое внимание было уделено исследованию морфологии, состава, строения и поверхности углеродных материалов набором современных физико-химических методов, включая методы электронной спектроскопии, низкотемпературной адсорбции азота, рамановской спектроскопии, инфракрасной спектроскопии, рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии и ультрамягкой рентгеновской спектроскопии эмиссии и поглощения. Для интерпретации спектральных данных и объяснения электрохимических наблюдений применялись результаты квантово-химического моделирования. Электрохимическое тестирование образцов было проведено в качестве электродов суперконденсаторах, анодов литий- и натрий-ионных аккумуляторов, катодов литий- и натрий-ионных конденсаторов при комнатных и пониженных температурах до –20 °С. Для бромированного азотсодержащего углеродного материала были достигнуты наиболее высокие значения удельной емкости в натрий-ионных аккумуляторах 1101–612 мАч/г при температуре 25 °С и 649–312 мАч/г при температуре –20 °С, при плотностях тока 0.1–2 А/г. Была установлена роль азотсодержащих и галогенсодержащих функциональных групп на поверхности углеродных материалов в накоплении катионов щелочных металлов в аккумуляторах и ионов электролитов в конденсаторах.

САМООРГАНИЗАЦИЯ НАНОЧАСТИЦ УГЛЕРОДА, КАК ПРОЦЕСС УПРАВЛЯЕМОГО РОСТА НАНОСТРУКТУРИРОВАННЫХ МАТЕРИАЛОВ

Ф.К. Шабиев^{1,2}, Ю.В. Пахаруков², С.А. Васильев³, Б.С. Ездин³, Р.Ф. Сафаргалиев²

¹Тюменский государственный университет ФГАОУ ВО ТюмГУ, Россия, Тюмень,
faridshab@mail.ru

²Тюменский индустриальный университет ФГБОУ ВО ТИУ, Россия, Тюмень

³Новосибирский государственный университет ФГАОУ ВО НГУ, Россия,
Новосибирск

На границах раздела несмешивающихся наножидкостей протекают сложные физико-химические процессы. Управляя ими, можно напрямую влиять на конечную структуру материала [1]. Это легло в основу наноархитектоники — новой парадигмы, направленной на изучение самоорганизации и самосборки для создания материалов с управляемой структурой. Основная задача наноархитектоники — найти параметры управления, которые приводят неравновесную систему к требуемому состоянию с заданной архитектурой [2]. Подход интегрирует методы контроля на атомном, молекулярном, супрамолекулярном и микроуровнях.

В данной работе комплексно изучалось взаимодействие графеновых наночастиц и углеводородов на межфазной границе с целью понять, как формируются упорядоченные кристаллические наноструктуры. С помощью оригинальной установки, предложен новый метод выращивания наноструктурированной плёнки из молекул углеводородов и графеновых нанопластин на границе раздела углеводород – графенсодержащая наножидкость (ГНЖ) на водной основе. С использованием методов рентгеноструктурного анализа и молекулярно-механического моделирования установлена структура плёнки. Исследование показало, что механизм роста плёнки связан с процессами самоорганизации графеновых наночастиц на границе ГНЖ-углеводород. Установлено, что управляющим параметром режимов роста пленок является теплоотвод от границы раздела и температура системы. В результате было определено три режима роста плёнок, приводящих к различным структурам. При быстром теплоотводе наблюдается медленный рост плёнки с образованием фрактальных структур типа множества Мандельброта. При медленном теплоотводе наблюдается быстрый рост пленки с формированием сплошной однородной структуры, не являющейся фракталом. При увеличении начальной температуры системы наблюдается взрывной рост с образованием аморфной пленки. Используя данные изучения механизма наноструктурирования на границе ГНЖ-углеводород, была разработана методика управляемого роста плёнок с заведомо известной структурой (рис).

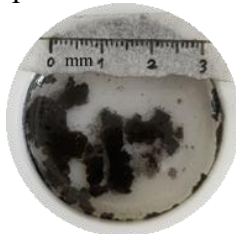


Рис. Надпись «Film», в виде тонкой плёнки (~200нм), произведенная на границе раздела ГНЖ-октан при помощи разработанной технологии управляемого роста

Исследование выполнено за счет гранта РФФИ № 25-71-00047

Список литературы:

1. Пахаруков, Ю. В., Шабиев, Ф. К., Сафаргалиев, Р. Ф., & Галунин, Е. В. (2025). *ЖТФ*, 95(3), 565-574.
2. K. Ariga, S. Watanabe, Mori T., J. Takeya, (2018) *NPG Asia Materials* 10(4) 90-106.

БИОСОВМЕСТИМЫЕ КОМПОЗИТЫ С УГЛЕРОДНЫМИ НАНОТРУБКАМИ

**Е.А. Образцова^{1,2,3,4,5}, Е.В. Сорокина⁴, А.Г. Матвеева^{1,2}, А.С. Богданова^{1,2},
А.Р.Покровская¹, С.И. Бирюков¹, А.Е. Томская^{1,3}, Д.В. Клинов^{1,2}**

¹МФТИ, Физтех, Россия, Долгопрудный Московская область

²Федеральный научно-клинический центр Физико-химической медицины им. Лопухина
Федерального медико-биологического агентства, Россия, Москва,

³Институт общей физики им. А.М. Прохорова РАН, Россия, Москва,

⁴Кафедра микробиологии, биологический факультет, Московский государственный
университет им. М.В. Ломоносова, Москва, Россия

⁵Балтийский федеральный университет им. И. Канта, Россия, Калининград
e-mail: e.a.obraztsova@gmail.com

Углеродные нанотрубки (УНТ) обладают уникальным сочетанием прочности, высокой тепловой и электрической проводимости и большой удельной площадью поверхности. Эти свойства открывают множество возможностей для их применения. В биомедицине, однако, использование УНТ ограничено, так как чистые УНТ обладают токсичностью и обычно выпускаются в виде порошка, неудобного для работы в макромасштабе. Одним из перспективных решений является создание пленок или объемных структур из УНТ, однако прочность таких пленок ограничена из-за слабых π - π связей и сил Ван-дер-Ваальса между нанотрубками.

Для улучшения механических свойств УНТ применяют методы модификации поверхности, химической сшивки и создания композитов. Эти методы также могут способствовать получению пористых структур, которые могут быть интересны для биомедицинских применений, например, для создания каркасов и субстратов для роста клеток. Такие субстраты особенно важны для нервных и сердечных клеток, чувствительных к электрической проводимости. УНТ положительно влияют на жизнеспособность клеток, их адгезию, созревание и морфологическое развитие, а также стимулируют пролиферацию. Чтобы такие пленки могли использоваться в качестве субстратов, они должны быть механически стабильными, электропроводными и нетоксичными для клеток.

В докладе будут представлены результаты исследования токсичности ряда наноуглеродных материалов, проанализированы возможные пути улучшения их биосовместимости и представлены результаты по разработке композитных материалов УНТ-белок для формирования каркасов и субстратов для роста клеток.

Работа была выполнена при поддержке РНФ 25-72-31032 – получение наноструктурированных материалов и их суспензий и Министерства высшего образования и науки Российской Федерации проекты FSMG-2023-0015 – анализ токсичности и биосовместимости.

ФОРМИРОВАНИЕ ТЕКСТУРИРОВАННЫХ АЛМАЗНЫХ ПЛЕНОК И ИГЛОПОДОБНЫХ КРИСТАЛЛИТОВ МЕТОДОМ ОСАЖДЕНИЯ ИЗ ГАЗОВОЙ ФАЗЫ

Р. Р. Исмагилов^{1,2}

¹ *Физический факультет МГУ им. М.В. Ломоносова, Москва*

² *БФУ им. И. Канта, Калининград*

Уникальные физико-химические свойства нано- и микро-структурированных кристаллитов алмаза привлекают значительный научный и технический интерес. В докладе будут представлены результаты исследований, связанные с текстурированными алмазными пленками и алмазными иглоподобными кристаллитами. Исследованные алмазные материалы были получены методом газофазного химического осаждения с различным способом активации газовой метан-водородной смеси: посредством создания плазмы тлеющего разряда постоянного тока (DC CVD) и с пиролизом на резистивно-нагретых нитях из тугоплавкого металла (HF CVD). Получаемые с помощью этих методик материалы представляют собой поликристаллические пленки, состоящие из алмазных кристаллитов, окруженных разупорядоченным углеродным материалом. Отделение алмазных кристаллитов производится селективным термическим окислением. В результате проведенных исследований были получены зависимости морфологии получаемых поликристаллических пленок от длительности процесса осаждения, типа и температуры подложки, концентрации прекурсоров в газовой смеси. С помощью методов растровой электронной микроскопии и комбинационного рассеяния света выявлены особенности формирования монокристаллических алмазных игл из газовой фазы в зависимости от параметров синтеза.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 25-72-31032 (<https://rscf.ru/project/25-72-31032>).

СТРУКТУРНЫЕ И МАГНИТНЫЕ ОСОБЕННОСТИ УГЛЕРОДНЫХ НАНОТРУБОК, СИНТЕЗИРОВАННЫХ КАТАЛИТИЧЕСКИМ МЕТОДОМ

Е.И. Куницына^{1,2}, Р.Б. Моргунов^{1,2}

¹Федеральный исследовательский центр проблем химической физики и медицинской химии РАН, Россия, Черноголовка

²Балтийский федеральный университет имени Иммануила Канта, Россия, Калининград

Углеродные нанотрубки (УНТ) обладают уникальными электронными, механическими и магнитными свойствами, определяемыми их структурой и остаточным содержанием катализатора. Контроль числа стенок, дефектности и присутствия железосодержащих наночастиц, примешивающихся при росте УНТ, является ключевым для создания функциональных материалов. Имеется ли взаимосвязь между структурной упорядоченностью УНТ и магнитным вкладом ферромагнитной примеси в магнитный момент образца остается неизвестным. Цель работы — идентификация двух типов углеродных нанотрубок и количества ферромагнитной примеси в них. УНТ были получены каталитическим CVD-синтезом. Для их исследования использовали рамановскую спектроскопию и SQUID-магнитометрию.

С помощью рамановской спектроскопии удалось разделить образцы с многостенными (кривая 1 на рис.1а) и одностенными УНТ (кривая 2 на рис.1а). Анализ гистерезисов двух исследуемых образцов позволил установить, что в образце многостенных УНТ содержит меньшую долю магнитных включений (остатков каталитического железа и его соединений), по сравнению с образцом одностенных УНТ. С другой стороны магнитные включения, образующиеся в многостенных УНТ в процессе CVD-синтеза, обладают большими размерами по сравнению магнитными включениями в одностенных УНТ (рис.1б).

Наше исследование позволяет установить взаимосвязь между структурными параметрами УНТ и их магнитным поведением. Мы показали, что повышение кристалличности и уменьшение дефектности в УНТ приводит к уменьшению коэрцитивной силы за счёт снижения анизотропии и большей дисперсии железных включений; а также, что магнитные свойства УНТ определяются не только количеством железа, но и степенью его включения в стенку нанотрубки (инкапсуляцией).

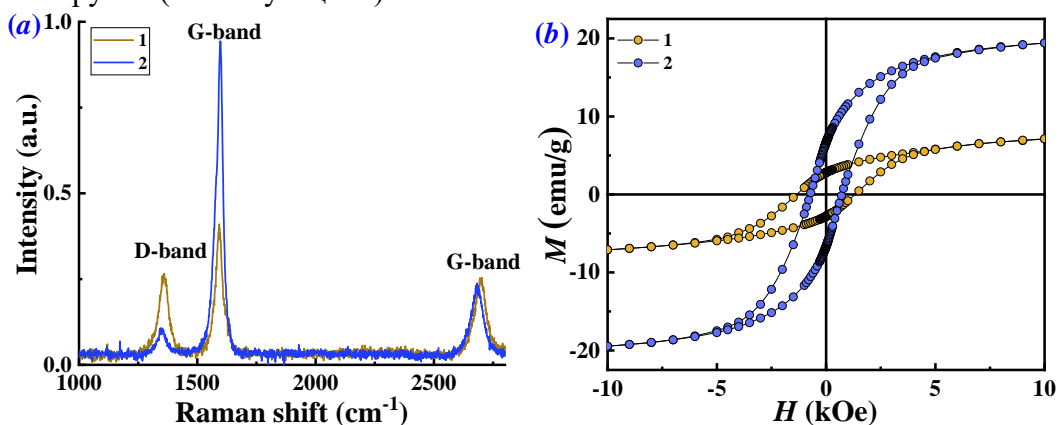


Рис. 1. (а) Рамановские спектры образцов. (б) Зависимости магнитного момента образцов от поля при температуре 2 К.

Сравнение структурных и магнитных методов исследования, позволят сделать шаги к направленному формированию магнитных свойств гибридных наноструктур УНТ/Fe для спинтронных и сенсорных применений.

Работа выполнена в рамках гранта Российского научного фонда № 25-72-31032, <https://rscf.ru/project/25-72-31032/>»

УГЛЕРОДНЫЕ МАТЕРИАЛЫ ДЛЯ АНОДОВ: ОТ ГРАФИТА ДО МЕТАМАТЕРИАЛОВ

Е.Г. Чупахин¹, Я.А. Масютин¹, А.В. Шевелюхина¹, Т.К. Капитанова¹, Т.О. Кулигина¹, В.В. Ларина¹

¹Балтийский федеральный университет им. И. Канта, г. Калининград, Россия,
echupakhin@kantiana.ru

Функциональные метаматериалы представляют собой искусственно спроектированные структуры со свойствами, не встречающимися в природе ¹.

В области проектирования анодных материалов на основе углерода можно говорить об их эволюции.

Графит характеризуется высокой восстанавливающей емкостью 372 мА*ч/г, низким рабочим потенциалом 0,1 В Li/Li⁺, высокой степенью цикличности и высокой технологичностью, однако данный материал достиг своего предела, и обладает умеренной скоростью заряда и разряда.

Второе поколение материалов анода - это углерод/кремниевые материалы. Кремний обладает высокой емкостью на 400 % превышающую графит, однако недостаток кремниевого анода заключается в его увеличивающемся объеме, который разрушает батарею, поэтому переход был сделан в сторону композитов.

Третье поколение материалов анода – это графен-стабилизированные материалы, где графен выполняет роль компонента, усиливающего токопроводящие свойства материала.

Логичным развитием анодных материалов на основе углерода является переход к инженерным материалам, архитектура которых позволяет динамически изменять геометрию и размер анода в процессе циклов заряд/разряд, т.е. в процессе его эксплуатации.

Примерами таких архитектур, для которых уже есть технологические прототипы, являются 3D-пористые каркасы (Aerogels, Foams) обладающие иерархической пористостью (макро-, мезо-, микропоры).

Упорядоченные массивы нанотрубок/нановолокон формируют вертикальную ориентацию, что обеспечивает оптимальные условия для переноса электронов и ионов в электрохимической системе и переход к сверхбыстрой зарядке и высокой мощности такого аккумулятора.

Дальнейшее развитие технологий анодов - это переход от химии материалов к архитектурному дизайну на микро- и наноуровне.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 25-72-31032, <https://rscf.ru/project/25-72-31032/>

1. Sun M, Qiu Z, Chen Q, et al. A Mechanical Metamaterial for Energy Absorption using Carbon Fiber Composite. Int J Mech Sci. 2025;295:110282.
doi:<https://doi.org/10.1016/j.ijmecsci.2025.110282>

**РЕСУРСОСБЕРЕГАЮЩИЕ ТЕХНОЛОГИИ ПРИ ПРОИЗВОДСТВЕ И
УТИЛИЗАЦИИ ЭЛЕКТРОХИМИЧЕСКИХ ИСТОЧНИКОВ ТОКА****Е. Ю Ван¹**¹Балтийский федеральный университет им. И. Канта, Россия, Калининград,
evan@kantiana.ru

При масштабном производстве химических источников тока (ХИТ) одной из значимых проблем является решение ресурсной задачи. В состав ХИТ входят различные ценные металлы, причем содержание их достаточно высокое. Поэтому отработанные ХИТ следует рассматривать как вторичное высококонцентрированное сырье для извлечения ценных компонент.

С масштабным ростом потребления человечеством ХИТ, их утилизация становится важнейшей экологической проблемой.

Основными компонентами ХИТ, в том числе и литий-ионных батарей (LIB), являются корпус, катод, анод, сепаратор и электролит.

Процесс переработки отработанных ХИТ многостадийный. Предварительная обработка включает в себя разрядку, измельчение и разборку, сортировку и зачистку для отделения переработанных материалов. Рыночные цены на металлы в электродных листах обусловлены их высоким спросом, несмотря на относительно низкую стоимость переработки корпуса и сепаратора. Переработка металлов из электродных листов дает значительные экономические преимущества. Кроме того, электродные материалы, присутствующие в этих листах, включая тройные катодные материалы (никель-кобальт-марганец-литий) и фосфат лития-железа, наряду с графитом, используемым в аноде, могут быть обработаны и очищены для повторного использования в производстве новых LIB. Этот процесс снижает зависимость от первичных минеральных ресурсов, а также способствует снижению производственных затрат. Поэтому переработка электродных листов является одним из основных направлений переработки, отработанных LIB.

Существует ряд отечественных и зарубежных разработок по вовлечению отработанных источников тока в рециклинг гидро или пирометаллургических процессов для извлечения тех или иных металлов.

Например, заявлен способ утилизации отработанных химических источников тока (Патент RU, № 2486262). Стадии передела: измельчение ХИТ, выщелачивание, магнитная сепарация и электролиз. Технология позволяет утилизировать химические источники тока на основе металлического Ni, Na, Ca, Cd, Mg, Ag, Pb и др. и одновременно получить товарную продукцию. Однако метод имеет ограничения, такие как необратимое структурное разрушение и зависимость от последующих стадий очистки для разделения металлов. Для устранения этих недостатков было объединено пирометаллургическое и гидрометаллургическое обогащение. Например, предложен способ утилизации отработанных марганцево-цинковых ХИТ гидрометаллургическим способом (Патент RU, №2164955), предполагающий стадии измельчения, магнитной сепарации, окислительного обжига, флотации, выщелачивания серной кислотой и электролитическому разделению цинка на катоде и марганца на аноде.

Такие гибридные стратегии не только позволяют напрямую регенерировать электродные материалы, но и обеспечивают баланс между эффективностью и стоимостью. Тем не менее, проблемы, возникающие при использовании обоих методов, сохраняются из-за узкого спектра типов утилизируемых ХИТ и особенно в отношении загрязнения окружающей среды (выбросы токсичных газов, сброс химических реагентов и т. д.).

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 25-72-31032, <https://rscf.ru/project/25-72-31032/>

ВЛИЯНИЕ РАЗЛИЧНЫХ КАТАЛИЗАТОРОВ НА КАРБОНИЗАЦИЮ ЦЕЛЛЮЛОЗЫ

А.В. Шевелюхина¹, Т.К. Капитанова¹, Т.О. Кулигина¹, В.В. Ларина¹

¹Балтийский федеральный университет имени И. Канта, г. Калининград, Россия, avshevelyukhina@kantiana.ru

Мезопористые углеродные материалы на основе целлюлозы представляют интерес для анодов ионных аккумуляторов благодаря их устойчивости и высокой пористости. Гидротермальная карбонизация (ГТК) целлюлозы ограничена низким выходом углерода и неконтролируемой пористостью, что затрудняет получение материалов с заданными свойствами [1]. Введение катализаторов, таких как NaOH и ZnCl₂, позволяет снизить температуру процесса ГТК, увеличить выход углерода, а также увеличить мезопористость и площадь поверхности пор [1, 2]. Целью настоящего исследования является изучение влияния катализаторов NaOH и ZnCl₂ на карбонизацию целлюлозы для получения мезопористых углеродов с улучшенными текстурными и электрохимическими свойствами. В работе поставлены следующие задачи: провести ГТК целлюлозы с использованием катализаторов в различных соотношениях; оценить влияние катализаторов на структуру материала.

Получение мезопористых углеродных материалов с применением катализаторов NaOH и ZnCl₂ осуществляется в несколько этапов: подготовка материалов и пропитка целлюлозы, предварительно активированной ацетатным методом, катализаторами (NaOH, ZnCl₂); гидротермальная обработка при 200 °С в течение 6 ч; промывка, сушка (60 °С, 4 ч) и карбонизация (400 °С, 2 ч);

Для проведения ГТК использовали следующее оборудование: муфельная печь, сушильный шкаф, гидротермальные реакторы, магнитная мешалка, аналитические весы. Характеристику полученных материалов проводили методом сканирующей электронной микроскопии (SEM). Использование в ГТК ZnCl₂ в качестве катализатора обеспечило более высокий выход углеродного продукта по сравнению с NaOH в соотношениях целлюлоза: катализатор (1:3): 18,4% (ZnCl₂) и 1,51% (NaOH). Снимки СЭМ образца углеродного материала, полученного с катализатором ZnCl₂, показывают, что данный продукт можно охарактеризовать как аморфный углерод (Рис. 1). Характеристика пор полученных материалов затруднена, что не позволяет оценить влияние рассмотренных катализаторов. Данная сложность будет решаться методом измерения площади поверхности по БЭТ.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 25-72-31032, <https://rscf.ru/project/25-72-31032/>.

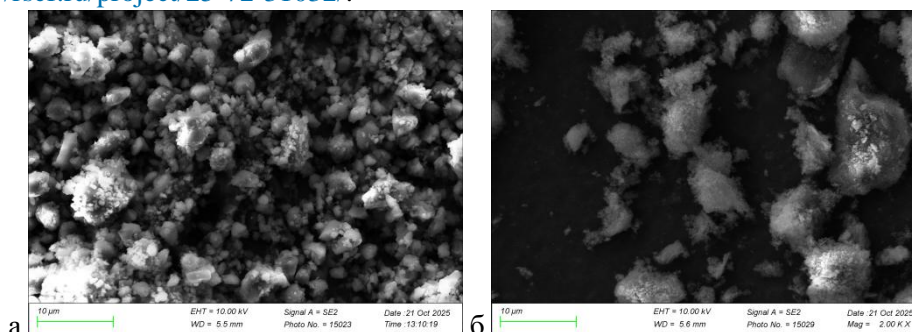


Рисунок 1. Изображение СЭМ материала, полученного с катализатором а) NaOH; б) ZnCl₂

[1] Zhu, X. *et al.* Role of Hydrochar Properties on the Porosity of Hydrochar-based Porous Carbon for Their Sustainable Application. *ACS Sustain. Chem. Eng.* **3**, 833–840 (2015).

[2] Neme, I., Gonfa, G. & Masi, C. Activated carbon from biomass precursors using phosphoric acid: A review. *Heliyon* **8**, e11940 (2022).

ПОЛУЧЕНИЕ И ПРИМЕНЕНИЕ НАНОУГЛЕРОДНЫХ МАТЕРИАЛОВ ПРИ ИЗГОТОВЛЕНИИ ЛИТИЙ-ИОННЫХ АККУМУЛЯТОРОВ И ПОСТЛИТИЕВЫХ ЭЛЕКТРОХИМИЧЕСКИХ ИСТОЧНИКОВ ТОКА

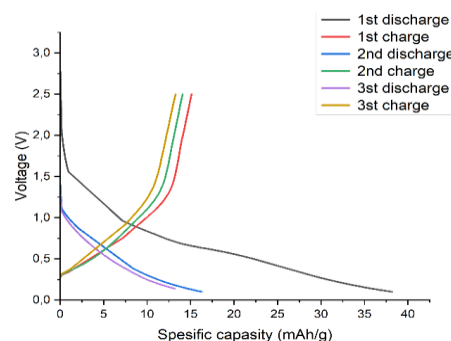
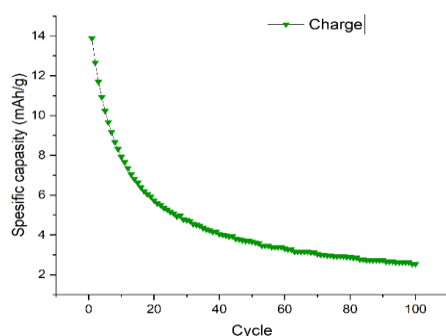
Е.Л. Васенькина¹, Я.А. Масютин¹

¹Балтийский федеральный университет им. И. Канта, Россия, Калининград,
vlekaterina@kantiana.ru

На сегодняшний день литий ионные аккумуляторы (ЛИА) являются неотъемлемой частью современных систем накопления энергии. Однако экологические аспекты добычи, ограниченность запасов лития и высокая стоимость конечной продукции вызывает необходимость развития альтернативных систем накопления, способных снизить потребительскую нагрузку на ЛИА. Натрий-ионные аккумуляторы (НИА) являются одними из самых перспективных систем накопления энергии, способных заменить ЛИА в некоторых сферах их активного применения. Схожесть принципа работы и сравнительно невысокая стоимость сырья способствуют развитию НИА.

Одним из важнейших компонентов, в значительной степени регламентирующих стоимость продукции и определяющих ее емкостные характеристики, является анод. Разработка универсального анодного материала, способного демонстрировать конкурентоспособные емкостные ресурсы как для литиевых, так и для натриевых источников тока является одним из фокусных векторов исследований последнего десятилетия.

В работе исследуются электрохимические показатели карбонизированной целлюлозы, активированной различными катализаторами, в качестве основного компонента анодного материала. Испытания проводятся в монетных корпусах форм фактора 2016 против литиевого электрода. В качестве электролита используется



коммерческий электролит 1.0 M LiPF_6 в $\text{EC}:\text{DEC}=1:1$, сепаратором выступает коммерческий сепаратор Celgard 2325. Испытания материала в качестве анодного материала НИА проводятся в монетных корпусах форм фактора 2032. В качестве электролита выступает коммерческий электролит 1.0 M NaFP_6 в DIGLYME , используется стекловолоконный сепаратор марки Whatman Grade. В состав активной пасты для ЛИА и для НИА помимо основного исследуемого материала также входят электропроводящая добавка сажа марки Super Black и связующий компонент 5% раствор PVDF в NMP. Сборка испытательных макетов осуществляется в среде аргона, содержание кислорода и воды не превышает 2 ppm. Кривые зависимости удельной емкости, а также зарядно-разрядные кривые тестовых испытаний приведены на рисунках ниже. Полученные экспериментальные результаты показывают перспективность дальнейших исследований с применением новых мезо- и нано- структурированных функциональных углеродных материалов.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 25-72-31032, <https://rscf.ru/project/25-72-31032/>.

ВЛИЯНИЕ КИСЛОТНОЙ ОБРАБОТКИ ОДНОСЛОЙНЫХ УГЛЕРОДНЫХ НАНОТРУБОК НА ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ С ФОСФОРОМ И ЭЛЕКТРОХИМИЧЕСКИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ В ЛИТИЙ-ИОННЫХ АККУМУЛЯТОРАХ

А.А. Ворфоломеева¹, Ю.В. Федосеева¹, А.В. Окотруб¹, Л.Г. Булушева¹

¹Институт неорганической химии им. А. В. Николаева СО РАН, Россия, Новосибирск, vorfolomeeva@niic.nsc.ru

Высокая теоретическая ёмкость (2596 мАч/г), стабильность, безопасность и доступность делают красный фосфор (Р) перспективным анодным материалом для литий-ионных аккумуляторов. Основными проблемами на пути к его практическому использованию остаются низкая электропроводность и сильное объёмное расширение в ходе электрохимического циклирования. Эти недостатки вызывают медленную кинетику электрохимических процессов, разрушение электрода и резкую потерю ёмкости. Наиболее распространенным подходом к решению этих проблем является создание композитов с углеродной компонентой, позволяющей как обеспечить проводимость, так и компенсировать объёмное расширение фосфора при циклировании, тем самым сохраняя целостность электродного материала.

Однослойные углеродные нанотрубки (ОУНТ) являются перспективным кандидатом для этой роли. Однако, внутренняя полость ОУНТ, способная выступать в роли защитного контейнера, не может быть эффективно использована из-за того, что нанотрубки образуют плотные и длинные пучки. В результате фосфор заполняет их неравномерно, а ионы лития не могут свободно проникать вглубь материала. Решением этих проблем является модификация структуры ОУНТ: укорочение нанотрубок, расщепление пучков и создание вакансионных дефектов в боковых стенках.

В нашей работе мы применили двухступенчатую обработку ОУНТ горячими минеральными кислотами с последующим отжигом в инертной атмосфере. Такая обработка привела к диспергированию нанотрубок, расщеплению пучков и образованию дефектов в боковых стенках. Согласно исследованиям методами ПЭМ, спектроскопии КРС и NEXAFS-спектроскопии, дефекты боковых стенок влияют на конденсацию паров фосфора, способствуя образованию коротких и неупорядоченных цепочек внутри ОУНТ. Взаимодействие термически испаренного лития с пустыми и заполненными фосфором ОУНТ изучалось с помощью модельных *in situ* экспериментов на источнике синхротронного излучения BESSY II. В случае перфорированных ОУНТ, заполненных фосфором (Р@hОУНТ), была обнаружена высокая дисперсность лития вдоль стенок нанотрубок и образование фосфида лития внутри ОУНТ. DFT-расчеты показали, что наличие инкапсулированного фосфора снижает энергетический барьер для проникновения лития внутрь ОУНТ через дефект боковой стенки. Электрохимические испытания подтвердили, что сочетание дефектов боковых стенок и инкапсуляции фосфора обладает синергетическим эффектом для повышения емкости. Электрод Р@hОУНТ достиг удельной емкости 946–460 мАч/г (при плотностях тока 0,1–2 А/г), превосходя показатели необработанных фосфор-заполненных ОУНТ в два раза. Мы объясняем этот результат улучшенной диффузией ионов лития, которые через дефекты в стенках легко проникают к диспергированным частицам фосфора.

ГИБРИДНЫЕ МАТЕРИАЛЫ НА ОСНОВЕ MoS_2 И rGO ДЛЯ НИЗКОТЕМПЕРАТУРНЫХ LI- И NA-ИОННЫХ АККУМУЛЯТОРОВ**А.А. Загузина¹, А.А. Ворфоломеева¹, А.В.Окотруб¹, Л.Г. Булушева¹**¹Институт неорганической химии им. А.В. Николаева СО РАН, Россия, Новосибирск, kotsun@niic.nsc.ru

Повсеместное применение литий-ионных источников (ЛИИ) тока в сфере компактных энергоносителей обуславливает повышение требований к их ключевым параметрам. Ввиду дефицита литиевого сырья активно ведутся разработки альтернативных систем хранения энергии на основе натрия (НИИ) с аналогичным принципом работы. В настоящее время требования к аккумуляторным системам значительно расширились: они должны не только обладать высокой плотностью энергии и мощности, быть безопасными и иметь продолжительный срок службы, но и сохранять работоспособность в широком диапазоне температур. При низких температурах основной причиной снижения емкости аккумуляторов является низкая кинетика электрохимических реакций из-за высоких энергетических барьеров, затруднённой подвижности М-ионов ($M = \text{Li}, \text{Na}$), а также значительное увеличение сопротивления из-за уменьшения ионной проводимости в объёме электролита и пассивирующего слоя на поверхности электрода. Следовательно, ключевой научно-технической задачей является целенаправленное конструирование функциональных наноматериалов для анодов М-ионных аккумуляторов, обеспечивающих оптимальный баланс между высокой электрохимической активностью и структурной целостностью при пониженных температурах ($\leq 0^\circ\text{C}$).

Перспективным кандидатом на роль анода в таких системах выступает дисульфид молибдена (MoS_2). Его преимущества обусловлены уникальной слоистой архитектурой с увеличенным расстоянием между слоями и значительной теоретической ёмкостью (669 мАч/г). Тем не менее, практическому применению MoS_2 препятствуют его низкая собственная электропроводность и прогрессирующая структурная деградация в процессе длительного циклирования. Эффективной стратегией преодоления этих ограничений является создание гибридов на основе MoS_2 и проводящей углеродной компоненты, например, восстановленным оксидом графена (rGO). Подобная модификация способствует структурной стабилизации анода, что проявляется в снижении внутреннего сопротивления при измерении спектров электрохимического импеданса электрода и повышении кулоновской эффективности электрохимических процессов. Данные эффекты являются важными для обеспечения работы аккумулятора в условиях низких температур.

Объектами исследования в данной работе были гибридные материалы на основе MoS_2 и rGO , синтезированные быстрым термолизом прекурсоров $(\text{NH}_4)_2\text{MoS}_4$ и оксида графена при температурах, образования высококристаллизованной фазы MoS_2 (выше 600°C). Электрохимическое тестирование осуществляли в двухэлектродных ячейках. Испытания осуществляли в контролируемом температурном режиме в диапазоне от комнатной температуры до -20°C . Гибрид $\text{MoS}_2/\text{rGO}_{600}$ продемонстрировал значительные удельные емкости при комнатной температуре в ЛИА: 1095 и 1050 мАч/г при 1 и 2 А/г на 24 и 32-м цикле. При снижении температуры и увеличении плотности тока до 2 А/г данный образец сохранил 62 и 22 % емкости. Это объясняется наличием избытка серы в образце, синтезированном при 600°C , по сравнению с аналогом. В НИИ в условиях низкой температуры лучшие показатели продемонстрировал гибрид $\text{MoS}_2/\text{rGO}_{700}$. Для него сохранение емкости составило 66 и 48 % при 0°C и при плотности тока 0,1 и 2 А/г. Высокие значения в НИИ объясняются обогащением структуры вертикально ориентированными слоями MoS_2 , которые ковалентно связаны с поверхностью rGO .

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

СТРУКТУРА И СВОЙСТВА АВТОИНТЕРКАЛИРОВАННЫХ СОЕДИНЕНИЙ НА ОСНОВЕ ГРАФИНОВЫХ СЛОЕВ

В.В. Павлик^{1,2}

¹Челябинский государственный университет, Россия, Челябинск

²Балтийский федеральный университет им. И. Канта, Россия, Калининград
vitaliypavlik@mail.ru

Графиновые слои, ввиду своей пористой структуры, являются перспективными материалами для хранения водорода и изготовления селективных фильтров. Автоинтеркалированные (АИ) фазы, состоящие из взаимовложенных графитовых слоев, также имеют высокую пористость, кроме того они структурно подобны кристаллам с отрицательной линейной сжимаемостью, которые могут найти применение при конструировании оптических сенсоров и датчиков давления. Настоящая работа посвящена исследованию структуры и свойств новых АИ соединений на основе графитовых слоев.

На первом этапе работы методом РМ7 был проведен расчет структуры двух типов одномерных (1D) АИ соединений, состоящих из взаимовложенных графитовых слоев α -, β 1-, β 2-, β 3-, γ 1- и γ 2-разновидностей с двумя и четырьмя атомами в цепях. Соединения I и II типов были получены посредством взаимного проникновения слоев через центры наибольших пор вдоль первого и второго по малости векторов трансляции слоев, соответственно. Далее, по аналогии с наиболее устойчивыми 1D-соединениями, были образованы трехмерные (3D) АИ фазы, структура и свойства которых были исследованы с помощью программного пакета Quantum ESPRESSO при использовании метода теории функционала электронной плотности (DFT) и нелокального функционала энергии vdW-DF.

Расчеты методом РМ7 показали, что наиболее устойчивыми 1D-соединениями являются АИ α -графин-1 и β 1-графин-2 I типа, поскольку удельные разностные энергии этих соединений, рассчитанные по отношению к изолированным слоям, равны -0.16 и -0.01 ккал·моль⁻¹·Å⁻¹, соответственно. Слои в структурах этих соединений имеют форму, близкую к плоской. Согласно DFT расчетам, кристаллические решетки 3D АИ фаз из α -графина-1 и β 1-графина-2 (рис. 1) относятся к пространственным группам $I4/mcm$ и $Ibam$, а плотности этих фаз равны 1.28 и 0.93 г/см³, соответственно. Молекулярно-динамическое (МД) моделирование показало, что фаза из α -графина-1 термически устойчива до 550 К. Установлено, что 3D АИ α -графин-1 обладает отрицательной линейной сжимаемостью вдоль оси c , наименьшее значение которой ($K_c = -11.7$ ТПа⁻¹) наблюдается при минимальном давлении. Объемный модуль упругости фазы равен 33.7 ГПа. Вдоль оси c в структуре АИ тетрагональной $I4/mcm$ фазы имеются протяженные поры, через которые, согласно МД расчетам (при 400 К), могут проникать молекулы H₂ (рис. 1б). Идентифицировать АИ фазы на основе α -графина-1 и β 1-графина-2 возможно путем анализа порошковых рентгенограмм, полученных при использовании излучения K α -серии хрома, в интервалах углов от 31 до 46° и от 17 до 20°, соответственно.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 25-72-31032 (<https://rscf.ru/project/25-72-31032>).

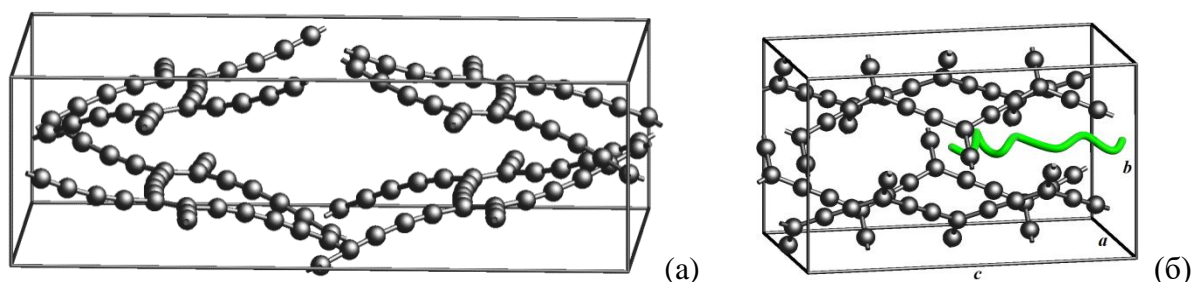


Рис. 1. (а) Элементарная ячейка АИ фазы из β 1-графина-2. (б) Стандартная траектория движения центра масс молекулы H₂ в суперячейке АИ фазы на основе α -графина-1.

СИСТЕМА ОБЪЕМНО-ЛОКАЛИЗОВАННЫХ ЭЛЕКТРОННЫХ СОСТОЯНИЙ В ПОЛОЖИТЕЛЬНО ЗАРЯЖЕННЫХ ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ ОДНОСТЕННЫХ УГЛЕРОДНЫХ НАНОТРУБКАХ

С.А. Вотяков^{1,2,3}, А.В. Осадчий^{1,2,3}

¹Национальный исследовательский ядерный университет МИФИ, Россия, Москва,

²Институт общей физики имени А.М. Прохорова РАН, Россия, Москва,

³Балтийский федеральный университет им. И. Канта, Россия, Калининград
savotyakov99@yandex.ru

Исследуются объемно-локализованные электронные состояния (SAMO для фуллеренов, pseudo-SAMO для нанотрубок) в одностенных углеродных нанотрубках (ОУН). Ранее такие состояния, локализованные в объеме полых наноструктур, исследовались в фуллеренах. Для фуллеренов SAMO характеризуются орбитальными s, p, d квантовыми числами и называются водородоподобными [1]. Двумерные квадраты волновых функций фуллерена C₆₀ для этих состояний были показаны как численно, так и экспериментально после воздействия лазерного излучения с параметрами: 120 фс, 400 нм; 120 фс, 800 нм [2]. Однако в данной области большой интерес представляют и ОУН, также являющиеся полыми наноструктурами, стабильными при зарядке.

Переходя к цилиндрически симметричным системам, таким как ОУН, как и в случае со сферически симметричными системами, для оценки наличия SAMO можно использовать аналитический потенциал заряженного цилиндра, рассчитанный с помощью уравнений Пуассона и Лапласа. Действительно, при положительной зарядке цилиндра возникает кулоновская потенциальная яма, глубина которой увеличивается при увеличении заряда. После аналитической оценки с помощью теории функционала электронной плотности были рассчитаны как бесконечные, так и конечные ОУН типа (10,0). В качестве класса аппроксимации обменно-корреляционного функционала энергии (XC) были выбраны приближения локальной плотности (LDA). На основе этих расчетов численно оценен полный потенциал полупроводниковой ОУН. Параметры цилиндра: радиус $R = 4 \text{ \AA}$, длина $l = 17,8 \text{ \AA}$.

Выявлено, что общий потенциал представляет собой суперпозицию кулоновского потенциала в центре нанотрубки и потенциала атомов на стенке нанотрубки. Именно в центре нанотрубки локализуются объемные состояния. Было показано, что система таких состояний практически повторяет систему состояний в фуллеренах, но с отличиями, обусловленными цилиндрической симметрией. В случае ОУН, изоповерхности квадрата волновой функции таких объемных состояний как бы вытягиваются вдоль трубки. В случае конечных структур, эти состояния дополнительно квантуются по оси цилиндра трубки.

Количество таких состояний увеличивается при положительной зарядке, что приводит к возникновению более высоких орбитальных чисел. Также по мере повышения энергии меняется и главное квантовое число. В конечных нанотрубках количество объемных состояний больше из-за возникновения состояний, квантующихся по оси нанотрубки, что является неким аналогом гармонического квантового осциллятора.

Расчеты выполнены на высокопроизводительном кластерном компьютере K-100 Института прикладной математики им. М.В. Келдыша РАН и Университетском кластере Национального исследовательского ядерного университета МИФИ.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 25-72-31032 (<https://rscf.ru/project/25-72-31032>).

Список литературы

- [1] B. K. Zoppi L, Martin-Samos L, Buckybowl superatom states: a unique route for electrontransport?, Phys Chem Chem Phys. 8 (2015) 6114–21.
- [2] J. Zhao, M. Feng, J. Yang, H. Petek, The Superatom States of Fullerenes and Their Hybridization into the Nearly Free Electron Bands of Fullerites, ACS Nano 3 (4) (2009) 853–864.

ТОПОЛОГИЯ И ЭЛЕКТРОТРАНСПОРТНЫЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ УГЛЕРОДНЫХ ПОЛИПРИЗМАНОВ

В.А. Куракин¹, Т.Н. Коберник²

¹Лаборатория 2D наноматериалов в электронике, фотонике и спинтронике, Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ», Москва, Россия, fromkurakin@mail.ru

²Центр энергетических технологий, Сколковский институт науки и технологий, Москва, Россия

Углеродные полипризмы ($C_{[n, m]}$ -призмы) – одномерные (1D) наноматериалы, которые могут быть отнесены к алмазоподобным фазам, поскольку атомы углерода (C) в кристаллических структурах таких наносистем четырёхкоординированы. $C_{[n, m]}$ -призмы образованы правильными атомными m -угольниками, расположенными вдоль их общих осей симметрии на равных расстояниях друг от друга (n – число этих m -угольников) (рис. 1). Согласно опубликованным результатам проведённых ранее *ab initio* расчётов, углеродные полипризмы способны проявлять полупроводящие и даже проводящие характеры [1], что совершенно несвойственно большинству известных алмазоподобных фаз. Актуальность представленной работы определяется необходимостью разобраться в причинах, обуславливающих металлическое поведение $C_{[n, m]}$ -призм. Целью настоящего исследования является численное моделирование электронных зонных структур углеродных полипризм путём применения к ним sp^3 -модели сильной связи.

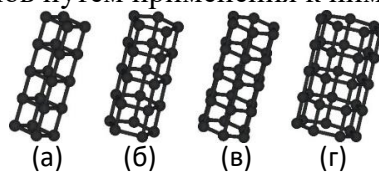


Рис. 1. Атомные структуры $C_{[n, 4]}$ - (а), $C_{[n, 5]}$ - (б), $C_{[n, 6]}$ - (в) и $C_{[n, 7]}$ - (г) призм.

В процессе компьютерного моделирования электронных свойств четырёх-, пяти-, шести- и семиугольных углеродных полипризм мы эксплуатировали квантово-механический подход к задачам вычислительного материаловедения, основанный на эмпирическом sp^3 -методе сильной связи, представленном в работе [2]. Результаты проделанных нами численных расчётов гласят о том, что электронной зонной структуре $C_{[n, 4]}$ -призмы характерен довольно солидный (более 2 эВ) энергетический «зазор». В то же самое время, у электронных зонных структур, построенных нами для пяти- и более угольных углеродных полипризм, полностью отсутствуют запрещённые зоны, т.е. любая из этих наносистем может уверенно выступать в роли хорошего проводника электрического тока. Мы полагаем, что электронные свойства $C_{[n, m]}$ -призм обусловлены прежде всего топологиями их атомных структур, а не конкретными химическими свойствами C. Таким образом, мы предсказываем, что схожее электротранспортное поведение будет наблюдаться и у полипризм из кремния (Si) или германия (Ge).

Выявленные в ходе настоящей работы электротранспортные характеристики углеродных полипризм могут нести в себе большую практическую пользу, т.к. открывают широкие перспективы потенциальных применений этих 1D низкоразмерных материалов в сфере наноэлектроники нового поколения.

Литература

1. Maslov M.M., Grishakov K.S., Gimaldinova M.A., Katin K.P. Carbon vs silicon polyprismanes: a comparative study of metallic sp^3 -hybridized allotropes. *Fullerenes, Nanotubes and Carbon Nanostructures*, 2019, 28 (2), 97.

2. Slater J.C., Koster G.F. Simplified LCAO Method for the Periodic Potential Problem. *Physical Review*, 1954, 94 (6), P. 1498–1524.

ДВУМЕРНЫЕ ЛИТИЕВЫЕ МАТЕРИАЛЫ ДЛЯ ХРАНЕНИЯ ВОДОРОДА: МОДЕЛИРОВАНИЕ ИЗ ПЕРВЫХ ПРИНЦИПОВ

А.С. Яковлев¹, К.П. Катин²

¹Аспирант, Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ»,
Россия, Москва, alexand.2001@mail.ru

²Профессор, ведущий научный сотрудник, руководитель лаборатории, Национальный
исследовательский ядерный университет «МИФИ», Россия, Москва, KPKatin@mephi.ru

В настоящий момент существует запрос на поиск и внедрение новых источников энергии, превосходящие по характеристикам такие традиционные источники, как уголь, нефть и газ [1]. Одним из перспективных энергоносителей является водород, обладающий рядом преимуществ: высокая энергоемкость, экологичность и распространённость [1]. Однако, необходимо отметить не решенную до сих пор проблему хранения и транспортировку водорода. Так, было показано, что физические методы хранения не могут широко использоваться. С другой стороны, химические методы, основанные на хранении в связанном состоянии, демонстрируют возможность размещения большого количества водорода в небольшом объеме [1]. Примеры таких систем – двумерные материалы [1, 2]. Недавние работы показывают, что двумерные материалы, например, графен, нитрид бора, способные эффективно запастись топливом [2]. Более того, показано, что допирование таких систем металлическими атомами, например, литием, натрием, значительно улучшает характеристики хранения водорода. В таком случае металл становится центром адсорбции, вокруг которого формируется «облако» молекул водорода [2].

Важно, что привлекательные для хранения водорода двумерные материалы должны быть легкими [2]. Атомы лития являются легчайшими металлами, поэтому в нашей работе предложено исследование материалов на их основе. Цель работы – исследовать способность хранения водорода в двумерных LiOH [3], Li₂O [4], Li₂C и Li₃C [5] моделированием из первых принципов. Ключевыми задачами являются расчет энергии адсорбции на одну молекулу и расчет массовой доли водорода.

В нашей работе было получено, что энергия адсорбции в LiOH и Li₂O слишком мала и соответственно составляет 20 и 105 мэВ. С другой стороны, расчеты показали, что энергия адсорбции для Li₃C при адсорбции двух и трех молекул составляет соответственно 194 и 174 мэВ при массовой доле водорода соответственно 5.78% и 8.43%. Таким образом, мы делаем вывод, что двумерный Li₃C является перспективным материалом для будущих приложений хранения водорода.

Работа поддержана Министерством науки и высшего образования Российской Федерации, проект FSWU-2024-0014.

Список литературы

1. Le T. T. et al. Fueling the future: A comprehensive review of hydrogen energy systems and their challenges //International Journal of Hydrogen Energy. – 2024. – Т. 54. – С. 791-816.
2. Ghotia S., Kumar P., Srivastava A. K. A review on 2D materials: unveiling next-generation hydrogen storage solutions, advancements and prospects //Journal of Materials Science. – 2025. – Т. 60. – №. 3. – С. 1071-1097.
3. Mounet N. et al. Two-dimensional materials from high-throughput computational exfoliation of experimentally known compounds //Nature nanotechnology. – 2018. – Т. 13. – №. 3. – С. 246-252.
4. Roondhe B. et al. H-and T-Li₂O monolayers: Latest addition to 2D flatlands //Applied Surface Science. – 2021. – Т. 556. – С. 149737.
5. Lu M., Zhang M., Liu H. Predicted two-dimensional electrides: Lithium–carbon monolayer sheet //Physics Letters A. – 2015. – Т. 379. – №. 39. – С. 2511-2514.

СТРУКТУРНЫЕ И ЭНЕРГЕТИЧЕСКИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ ДИАМАНОВ, ОБРАЗОВАННЫХ ИЗ НОВЫХ АЛЛОТРОПОВ ГРАФЕНА: РЕЗУЛЬТАТЫ КОМПЬЮТЕРНОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ

Ю.А. Байетдинов¹

¹Национальный исследовательский ядерный университет МИФИ
Россия, г. Москва, e-mail: yabauetdinov@gmail.com

Двумерные углеродные материалы на основе графена остаются в центре внимания современной наноэлектроники и фотоники. Одним из наиболее перспективных направлений является исследование диаманов — тонких слоёв с sp^3 -гибридизацией, получаемых из графена за счёт межслойных ковалентных связей [1]. Синтез диаманов открывает возможность создания материалов с широкими запрещёнными зонами и высокой жёсткостью при сохранении нанометровой толщины. Однако устойчивость таких структур, особенно на основе новых аллотропов графена (бифенилен, graphyne, DNQ-graphene и др.), остаётся недостаточно изученной, что и определяет актуальность проведённого исследования.

Целью исследования являлся компьютерный анализ структурных, электронных, механических и оптических свойств диаманов, образованных из новых аллотропов графена. Для достижения цели были поставлены следующие задачи: сформировать модели диаманов на основе восьми различных аллотропов графена; выполнить оптимизацию атомных структур и оценку энергетических характеристик; исследовать кинетическую и термическую стабильность при повышенных температурах; рассчитать электронные спектры, упругие константы и оптический отклик.

В рамках исследования использовались современные методы квантово-механического моделирования, основанные на приближении функционала плотности. Проведённая оптимизация структур и анализ энергетических характеристик позволили получить достоверные данные о стабильности и свойствах диаманов. Для изучения термического поведения и межслойных взаимодействий применялось численное моделирование, обеспечивающее высокую точность описания атомных связей и энергетических барьеров [2].

Получено восемь моделей диаманов, три из которых (на основе pristine-graphene, squaragraphene и 6,6,12-graphyne) продемонстрировали термическую устойчивость до 500 К. Энергетические барьеры распада составили 2.8–5.4 эВ, что сопоставимо с прототипом диамана. Рассчитанные ширины запрещённых зон лежат в пределах 1.5–4.2 эВ (по HSE), модули Юнга — 247–499 Н/м, коэффициенты Пуассона — 0.02–0.55. Оптический анализ показал выраженную активность в видимом диапазоне, что открывает перспективы применения в оптоэлектронике и датчиках.

Основная трудность связана с кинетической нестабильностью ряда структур вследствие внутренних напряжений в углеродной решётке. Для её снижения предложено использовать частичную функционализацию поверхности или выбор оптимального типа аллотропа (четноциклические структуры).

Результаты демонстрируют возможность создания нового класса двумерных диаманов с регулируемыми электронными и оптическими свойствами. В дальнейших работах планируется исследование многослойных систем и гетероструктур на основе диаманов и нитрида бора для реализации элементов наноэлектроники следующего поколения.

Список литературы

1. Chernozatonskii L. A. et al, Jetp Letters. 134 90 (2009).
2. K.P. Katin et.al, FlatChem. 44 100622 (2024).

СТРУКТУРНО-ЗАВИСИМЫЕ МАГНИТНЫЕ СВОЙСТВА ГРАФЕНА НА НИКЕЛЕВОЙ ПОДЛОЖКЕ

С.Н. Кашин^{1,2}, Е.В. Дворецкая¹, Р.Б. Моргунов^{1,2}

¹Федеральный исследовательский центр проблем химической физики и медицинской химии РАН, Черноголовка, Россия

²Балтийский федеральный университет им. Иммануила Канта, Калининград, Россия

Исследовано влияние подложки никеля на магнитные свойства графена, выращенного на ней методом химического осаждения из газовой фазы (CVD), который обеспечивает формирование упорядоченного монослоя графена на металлической подложке [1]. Для исследования образцов были применены методы рамановской спектроскопии и СКВИД-магнитометрии. С помощью метода рамановской спектроскопии была проведена аттестация образца (рис. 1а), из которой хорошо видны пики, характерные для колебаний решетки графена [2].

Петля гистерезиса при температуре $T = 2$ К (рис. 1б) характеризуется намагниченностью насыщения $M_s \sim 4$ емг/г и коэрцитивной силой $H_c \sim 14$ Ое, что типично для систем с индуцированным поверхностным магнетизмом, возникающим вследствие взаимодействия π -электронов углерода с 3d-орбиталями никеля [1, 3]. Магнитный момент в магнетонах бора на атом углерода составляет 0.01 μ_B /атом, что близко к значению 0.05 μ_B /атом, полученного для такой системы в [4]. Полученные результаты согласуются с [3,4], где отмечается возникновение ферромагнитного упорядочения в графеновых слоях, осаждённых на ферромагнитных подложках.

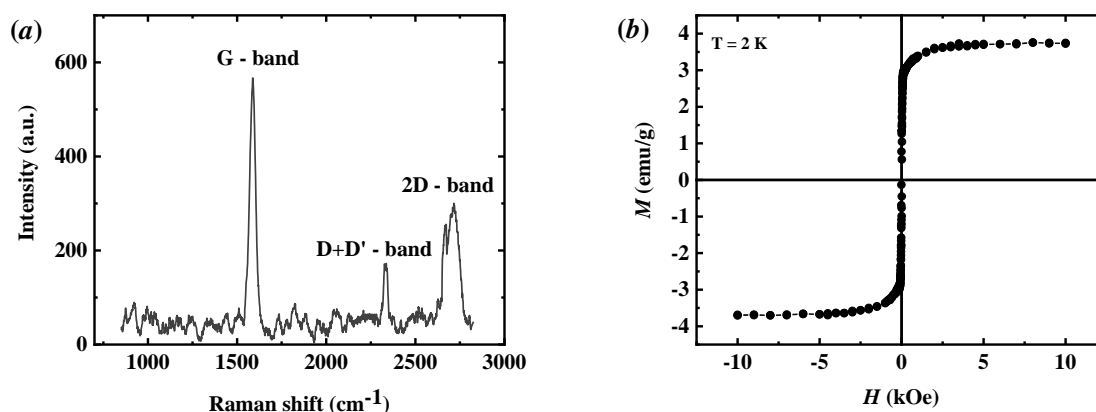


Рис. 1. (а) Рамановский спектр образца. (б) Полевая зависимость магнитного момента графена, полученная вычитанием вклада подложки при температуре 2 К.

Спин-поляризация π -электронов, возникающая за счёт гибридизации с 3d-орбиталями никеля, обеспечивает синергизм магнетизма и проводимости графена, который может быть использован для магнито-электрических преобразований в сенсорах угла, смещения или деформации.

Работа выполнена в рамках гранта Российского научного фонда № 25-72-31032, <https://rscf.ru/project/25-72-31032/>

Список литературы

- [1] Dedkov Y. S., Fonin M. Electronic and magnetic properties of the graphene–ferromagnet interface // *New Journal of Physics*. — 2010. — Vol. 12. — P. 125004.
- [2] Sparavigna A.C. Graphene and graphene oxide (raman spectroscopy). — 2024.
- [3] Voloshina E., Dedkov Y. S., Generalov A., Weser M., Horn K. Electronic structure and magnetism of graphene on metals // *Physical Chemistry Chemical Physics*. — 2011. — Vol. 13. — P. 12203–12210.
- [4] Weser M., Rehder Y., Horn K., Sicot M., Fonin M., Preobrajenski A. B., Voloshina E. N., Goering E., Dedkov Yu. S. Induced magnetism of carbon atoms at the graphene/Ni(111) interface // *Applied Physics Letters*. — 2010. — Vol. 96. — № 1. — P. 012504.

ТЕМПЕРАТУРНЫЕ ВАРИАЦИИ НАМАГНИЧЕННОСТИ НАНОКАРБИДА МОЛИБДЕНА

М.В. Бахметьев¹, Р.Б. Моргунов¹

¹Балтийский федеральный университет им. Иммануила Канта, Россия, Калининград

Нанокарбид молибдена в различных фазах является сверхпроводником второго рода [1]. Размер и структура наночастиц Mo_2C зависят от условий пиролиза. Частицы размером <5 nm образуются в фазе $\alpha\text{-Mo}_2\text{C}$, а более крупные частицы диаметром >50 nm образуются в фазе $\beta\text{-Mo}_2\text{C}$ при температуре 850°C [1]. Эти две фазы обладают сверхпроводимостью с критической температурой T_c в интервале 6.7–7.3 К и 8.1–12.2 К соответственно. Возможность получения наночастиц Mo_2C этих фаз из матричной системы на основе карбораниленсилоксана, полученного из Мо, делает их идеальной системой для исследования размерных эффектов, влияющих на соответствующие сверхпроводящие свойства двух фаз. В данной работе исследовался нанокарбид молибдена с размерами наночастиц ~ 800 nm.

С помощью СКВИД-магнетометра были получены температурные зависимости намагниченности в интервале температур 2–4.2 К (рис. 1 а). Увеличение диаметра наночастиц до ~ 800 nm приводит к уменьшению критической температуры сверхпроводника T_c до 4 К по сравнению с наночастицами Mo_2C диаметром <50 nm. На рис. 1 б представлены петли гистерезиса для Mo_2C . Петля гистерезиса для $T = 2$ К соответствует петле гистерезиса для типичного сверхпроводника второго рода. При нагревании образца до $T = 4.2$ К, сверхпроводящего вклада в петлю гистерезиса не наблюдается.

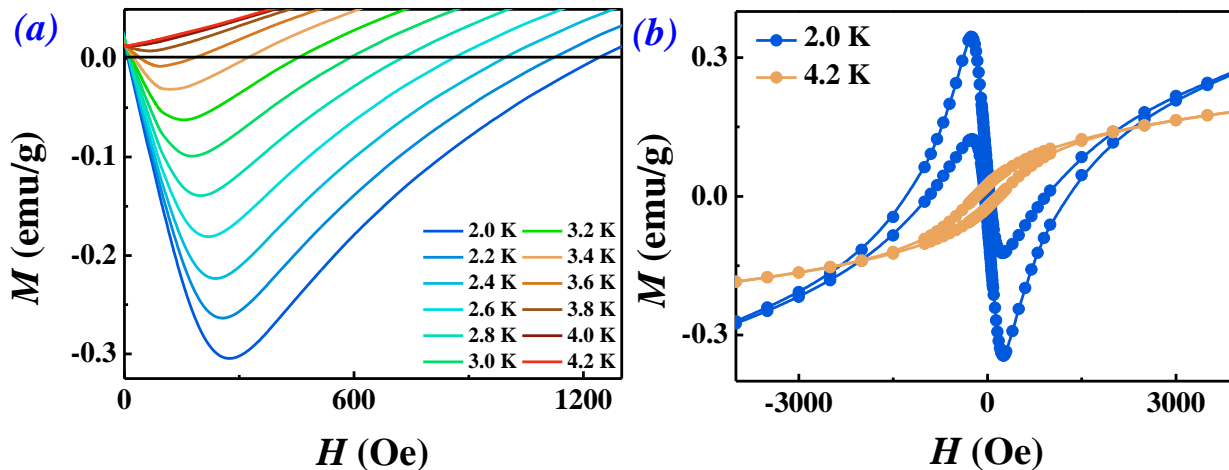


Рис. 1. (а) Температурные зависимости намагниченности в интервале $T = 2\text{--}4.2$ К. (б) Петли гистерезиса при $T = 2$ К и 4.2 К.

Температурные вариации намагниченности нанокарбида молибдена дают представления о сверхпроводимости Mo_2C . Эти знания могут найти применение при изготовлении химических соединений двумерных карбидов переходных металлов MXenes [2], которые относятся к новому классу высокопрочных двумерных материалов с потенциальными применениями в области хранения энергии и катализа.

Работа выполнена в рамках гранта Российского научного фонда №25-72-31032, <https://rscf.ru/project/25-72-31032/>.

[1] Kotel-Veetil M.K., Qadri S.B., Osofsky M. et. al. J. Phys. Chem. C 2007, 111, 16878.

[2] Geng D., Zhao X., Chen Z. et. al. Adv. Mater. 2017, 29, 1700072.

ПРОГНОЗИРОВАНИЕ СТЕПЕНИ ФИЛЬЕРНОЙ ВЫТЯЖКИ ВОЛОКОННЫХ КОМПОЗИТОВ С УГЛЕРОДНЫМИ НАНОТРУБКАМИ

А.В. Шульгин¹, О.О. Молоканова¹, О.А. Молоканова¹

¹Балтийский федеральный университет им. И. Канта, Россия, Калининград,
ashulgin@kantina.ru

Актуальность исследования обусловлена высокой ресурсоёмкостью традиционных методов разработки композитов, требующих до 24 месяцев исследований и значительных финансовых затрат. В условиях роста промышленного спроса на материалы с предсказуемыми функциональными свойствами особенно востребованы гибридные подходы, объединяющие эксперимент, математическое моделирование и методы искусственного интеллекта. Применение таких цифровых инструментов позволяет сократить сроки НИОКР до 6 месяцев, снизить затраты на 50 % и обеспечить точность прогнозирования до 85–90 %.

Целью работы является прогнозирование степени фильерной вытяжки волоконных композитов, модифицированных углеродными нанотрубками, с использованием комплексного анализа экспериментальных данных и математического моделирования.

В качестве модельной полимерной матрицы в работе использовался – полиамид марок ПА6 Волгамид (производства ПАО «КуйбышевАзот», Россия) и ПА66Л Гродномид (производства ОАО «Гродно Азот», Беларусь). В качестве наполнителя использовались одностенные углеродные нанотрубки в виде мастербатча марки ОУНТ УДО 827 серия Б (производства ООО «Универсальные добавки», Россия).

В работе решались следующие задачи:

- экспериментальное исследование влияния малых концентрации углеродных нанотрубок (до 10 масс. %) на реологическое поведение полиамидных волокон в процессе переработки в камере лабораторного двухшнекового экструдера;
- установление зависимости между скоростью приёмно-тянущего устройства и достигаемой кратностью фильерной вытяжки для различных композиций;
- разработка гибридных математических моделей, описывающих зависимость фильерной вытяжки волоконных композитов от концентрации углеродных нанотрубок;
- верификация прогнозирования моделей и оптимизация состава композитов с применением алгоритма машинного обучения XGBoost.

Для анализа данных разработаны гибридные модели на основе полиномиальных функций с экспоненциальной коррекцией. Алгоритм XGBoost выявил оптимальный состав - ПА6 с 3 масс. % нанотрубок, обеспечивающий максимальную стабильность фильерной вытяжки. Перспективы работы связаны с внедрением разработанной системы в промышленные линии, масштабированием подхода на другие полимерные матрицы и интеграцией цифровых двойников.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 25-72-31032 (<https://rscf.ru/project/25-72-31032>).

ВЛИЯНИЕ ФОРМЫ ВЫСОКОДИСПЕРСНЫХ УГЛЕРОДНЫХ НАНОСТРУКТУР НА ЧАСТОТНЫЕ ЗАВИСИМОСТИ ЭЛЕКТРИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК КОМПОЗИТОВ НА ОСНОВЕ ОРГАНОСИЛОКСАНОВ

Е.И. Климова¹, О.О. Молоканова¹, О.А. Молоканова¹

¹Балтийский федеральный университет имени И. Канта, Россия, Калининград,
EIKlimova@kantiana.ru

Композитные материалы на основе полиорганосилоксанов и углеродных наполнителей представляют значительный интерес для разработки гибкой электроники биомедицинского назначения. Высокая эластичность, формастабильность, термо- и химическая стабильность силоксанов в сочетании с их биосовместимостью делают их идеальной матрицей для интеграции с подвижными биологическими объектами.

Для придания материалам заданных электрофизических характеристик в силоксановую матрицу вводились два типа высокодисперсных углеродных наполнителей различной морфологии: одностенные углеродные нанотрубки (ОУНТ) и сферические углеродные частицы. Цель настоящей работы состояла в изучении влияния форм-фактора гибридного углеродного наполнителя на частотные характеристики композитов на основе полиорганосилоксана.

Измерение импеданса выполнялись на потенциостате-гальваностате Р-40Х, Электрические измерения проводились по ГОСТ 20214-74 с помощью вольтметра осциллографического GDM 79061, диаметр измерительного электрода 25 мм.

Реализация работы включала четыре последовательных этапа: разработку методик синтеза, получение и исследование образцов, обработку экспериментальных данных и верификацию результатов. Установлено существенное влияние формы углеродных наноструктур на частотные зависимости электрических характеристик композитов. Образцы, содержащие только ОУНТ, демонстрировали выраженный реактивный характер сопротивления с плавным снижением импеданса при увеличении концентрации наполнителя. При этом во всем исследованном диапазоне частот (1 кГц - 0,5 МГц) сохранялись диэлектрические свойства композитов.

Напротив, введение сферических углеродных частиц приводило к кардинальному изменению частотной зависимости импеданса. Композиты с 5 мас.% сферического наполнителя характеризовались частотно-независимым импедансом и проявляли скачкообразное уменьшение активной компоненты сопротивления (Re) в 1,5-10 раз в области критических частот 120-280 кГц. Наблюдаемый переход от диэлектрического к резистивному типу поведения свидетельствует о принципиальном изменении механизма электропроводности.

Таким образом, практическая значимость работы подтверждается возможностью управления типом электропроводности через морфологию наполнителя. Это открывает перспективы создания новых функциональных материалов для электроники, включая частотно-селективные элементы и сенсорные системы.

Проведенное исследование демонстрирует возможность целенаправленного проектирования электропроводящих материалов с программируемыми свойствами через контроль морфологии наполнителей.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 25-72-31032 (<https://rscf.ru/project/25-72-31032>).

СТРУКТУРА НОВЫХ СЛОЕВ ГРАФЕНА И ФТОРОГРАФЕНА 4-6-9

М.Е. Беленков¹, В.М. Чернов¹, В.А. Грешняков^{1,2}¹Челябинский государственный университет, Россия, Челябинск, me.belenkov@gmail.com²Балтийский федеральный университет им. И. Канта, Россия, Калининград

Графен является перспективным материалом для нанoeлектроники из-за высокой термической стабильности, большой прочности и высокой электропроводности. Однако для использования графена в полупроводниковой электронике необходимо модифицирование свойств для создания запрещенной зоны.

Известно, что функционализация графенового слоя неуглеродными атомами приводит к изменению свойств материала. Кроме того, полиморфные модификации графена могут обладать свойствами, отличными от свойств гексагонального графена L_6 и других полиморфов [1], что делает их изучение актуальным. При функционализации полиморфных модификаций графена свойства получаемого материала также могут отличаться от функционализированного L_6 графена. В данной работе приведены результаты расчетов структуры и электронных свойств нового графенового слоя L_{4-6-9} и основанного на нем нового фторографенового слоя $F-L_{4-6-9}$.

Моделирование проводилось при помощи метода теории функционала плотности в обобщенном градиентном приближении. Для расчетов использовался программный пакет Quantum Espresso. Для проведения расчетов были выбраны элементарные ячейки из 24 атомов углерода. В фторографеновом слое к каждому углеродному атому присоединен 1 атом фтора. В результате оптимизации оба слоя оказались устойчивыми. На рисунке 1 приведены результаты моделирования графенового и фторографенового слоев L_{4-6-9} .

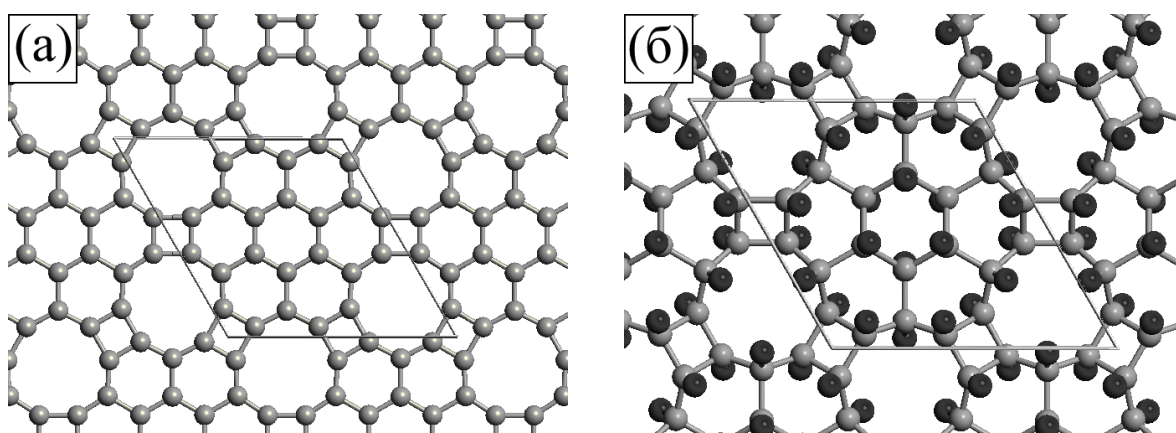


Рис. 1. Слой и элементарная ячейка: (а) графена L_{4-6-9} ; (б) фторографена $F-L_{4-6-9}$ (серым цветом обозначены атомы углерода, черным – фтора)

По результатам модельных расчетов, графен L_{4-6-9} является проводником, а фторографен $F-L_{4-6-9}$ обладает шириной запрещенной зоны 3.04 эВ. Энергия сублимации фторографенового слоя составляет ~14.0 эВ/CF. Это значение сопоставимо со значениями энергий сублимации фторографеновых слоев $F-L_6$, $F-L_{4-8}$, $F-L_{3-12}$, $F-L_{4-6-12}$, $F-L_{5-7}$ [2] и является достаточно большим, что может свидетельствовать о возможности существования рассматриваемого слоя при нормальных условиях. Рассмотренные в настоящей работе слой графена и фторографена могут найти применение в нанoeлектронике.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 25-72-31032 (<https://rscf.ru/project/25-72-31032>).

[1] Е.А. Беленков, В.А. Грешняков, Вестник ЮУрГУ. Серия «Математика. Механика. Физика», 9 (3), 51-57, (2017).

[2] М.Е. Belenkov, A.V. Butakov, V.M. Chernov, Chelyabinsk Physical and Mathematical Journal, 9 (3), 514-522, (2024).

СТРУКТУРА НАНОКРИСТАЛЛОВ ИЗ СВЯЗАННЫХ ЗИГЗАГООБРАЗНЫХ УГЛЕРОДНЫХ НАНОТРУБОК

А.М. Сабуров¹, В.А. Грешняков^{1,2}

¹Челябинский государственный университет, Россия, Челябинск, lekha_saburov@mail.ru

²Балтийский федеральный университет им. Иммануила Канта, Россия, Калининград

Полимеризованные углеродные нанотрубки (УНТ) представляют собой соединения, отличающиеся высокой твердостью и формирующиеся при высоких давлениях [1]. Гибридизация атомов углерода в таких соединениях может быть различной – от sp^2+sp^3 до чистой sp^3 гибридизации. На практике в качестве предшественников используют нанотрубки с диаметрами более нанометра [1], однако нанотрубки с небольшими диаметрами и большой кривизной поверхности должны быть более перспективными предшественниками для получения жесткосвязанных УНТ. Поэтому в данной работе выполнены расчеты возможной структуры нанокристаллов из связанных УНТ (6,0).

При использовании методики получения новых соединений [2], полуэмпирического метода РМЗ и моделей, состоящих не менее чем из 1000 атомов, установлена структура двух фаз. Первая фаза – T(6,0)b9 – гибридная с 4-членными кольцами в областях соединения соседних УНТ (рис. 1). Нанокристаллы второй фазы состоят только из атомов в состояниях sp^3 гибридизации (рис. 1) и близки по строению к алмазоподобной фазе LA7 из работы [3]. Оценочные плотности углеродной составляющей нанокристаллов фаз T(6,0)b9 и LA7 изменяются от 2.6 до 2.8 г/см³.

В дальнейших исследованиях необходимо изучить возможность формирования рассмотренных в данной работе углеродных соединений в процессе сильного сжатия УНТ при использовании метода теории функционала плотности.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 25-72-31032 (<https://rscf.ru/project/25-72-31032>).

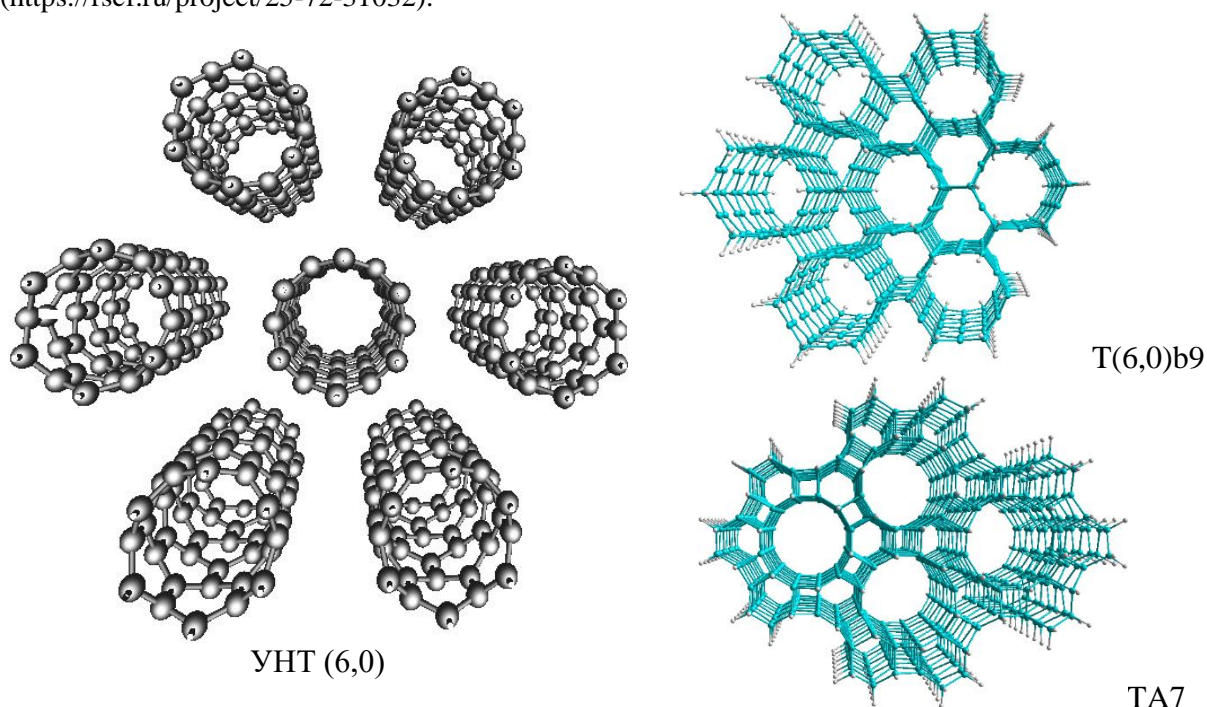


Рисунок 1. Фрагменты структуры жгута углеродных нанотрубок (6,0) и нанокристаллов из связанных нанотрубок.

[1] Z.W. Wang, Y.S. Zhao, K. Tait et al. // Proc. Natl. Acad. Sci. USA. 2004. V. 101, no. 38. P. 13699-13702.

[2] E.A. Belenkov, V.A. Greshnyakov // New Carbon Mater. 2013. V. 28. P. 273-283.

[3] Е.А. Беленков, В.А. Грешняков // Физика твердого тела. 2015. Т. 57, № 6. С. 1229-1239.

ТРЕХМЕРНО ПОЛИМЕРИЗОВАННЫЙ ФУЛЛЕРИТ C_{60} НИЗКОЙ ПЛОТНОСТИ**Ф.М. Самборский¹, В.А. Грешняков^{1,2}**¹Челябинский государственный университет, Россия, Челябинск,
fedor.samborsky@yandex.ru²Балтийский федеральный университет им. Иммануила Канта, Россия, Калининград

При высоких давлениях из фуллеренов могут формироваться углеродные фазы, отличающиеся высокой твердостью, которые называются полимеризованными фуллеритами [1]. Как правило, на плотность и твердость полимеризованных фуллеритов оказывает определяющее влияние доля атомов, находящихся в sp^3 гибридинизованных состояниях. До настоящего времени еще не установлены все возможные формы полимеризованных фуллеритов, поэтому в данном теоретическом исследовании выполнена попытка прогнозирования структуры трехмерно полимеризованных фуллеритов C_{60} с пониженной долей sp^3 гибридинизованных атомов в объеме соединения.

Модельное получение структуры с помощью сшивки предшественников выполнено на основе методики из работы [2] при использовании метода теории функционала плотности в обобщенном градиентном приближении (DFT-GGA), апробированного в работе [3]. Установлена возможность существования трехмерной фазы из связанных цепочек полимеризованных фуллеренов C_{60} (рисунок 1а) с 20-процентной долей sp^3 гибридинизованных атомов. Эта фаза характеризуется кубической симметрией $Pm\bar{3}$ ($a = 9.10 \text{ \AA}$) и плотностью 1.59 г/см^3 . Полная энергия полимеризованного кубического фуллерита выше энергии алмаза только на 0.25 эВ/атом . Расчет электронной структуры $Pm\bar{3}$ фазы показал, что полимеризованный фуллерит должен быть полупроводником, ширина запрещенной зоны которого более чем на 80 % меньше соответствующей величины для алмаза (рисунок 1б).

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 25-72-31032 (<https://rscf.ru/project/25-72-31032>).

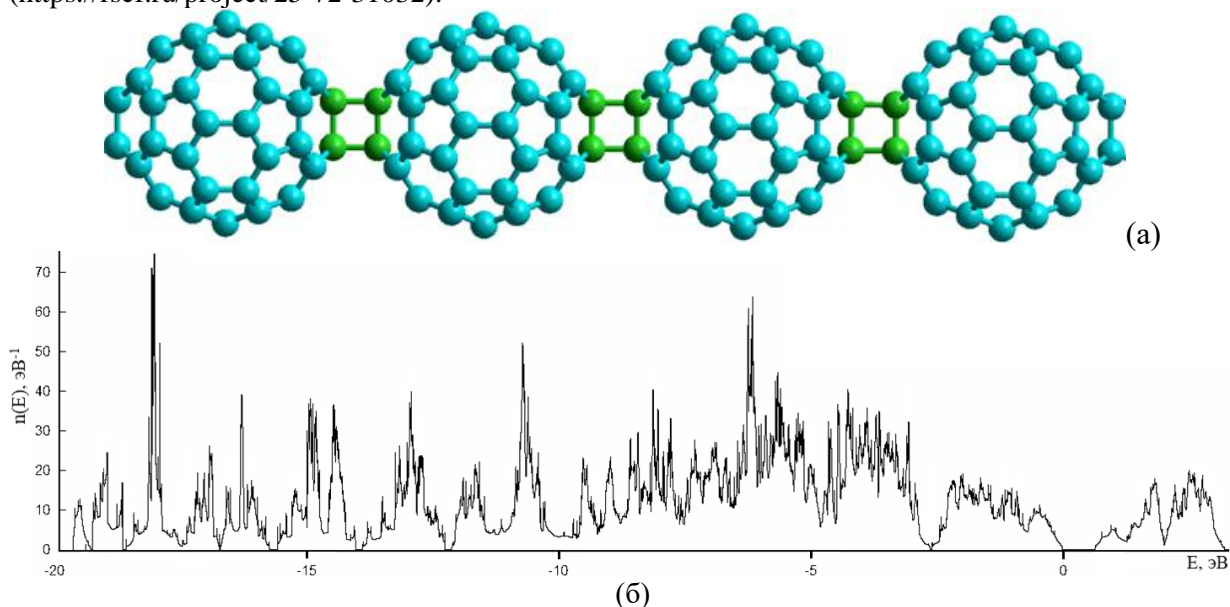


Рисунок 1 - Фрагмент структуры (а) и плотность электронных состояний (б) кубического трехмерно полимеризованного фуллерита C_{60} , рассчитанные методом DFT-GGA.

[1] J. Laranjeira, L. Marques, M. Melle-Franco, K. Strutynski, M. Barroso. Clathrate structure of polymerized fullerite C_{60} // Carbon. 2022. V. 194. P. 297-302.

[2] Е.А. Беленков, В.А. Грешняков. Классификация структурных разновидностей углерода // Физика твердого тела. 2013. Т. 55. С. 1640-1650.

[3] В.А. Грешняков. Первопринципное исследование L_{4-} , L_{3-6-} и L_{3-4-6-} -алмазоподобных трубчатых наноструктур // Журнал структурной химии. 2023. Т. 64. С. 106790.

ГОФРИРОВАННЫЕ ПОВЕРХНОСТИ ДЛЯ СОЗДАНИЯ УПОРЯДОЧЕННЫХ ПОДЛОЖЕК С ЦЕЛЬЮ СЕПАРАЦИИ БАКТЕРИЙ РАЗНОГО РАЗМЕРА

А.В. Шабиева¹, Ю.В. Пахаруков³, Сафаргалиев³ Ф.К. Шабиев^{2,3}

¹Тюменский медицинский университет ФГБОУ ВО ТМУ, Россия, Тюмень

²Тюменский государственный университет ФГАОУ ВО ТюмГУ, Россия, Тюмень,

³Тюменский индустриальный университет ФГБОУ ВО ТИУ, Россия, Тюмень

faridshab@mail.ru

Углеродные наноструктуры это уникальные нанообъекты со сложной структурой и удивительными, зачастую с приставкой «самый», свойствами [1]. По этой причине использование углеродных наноструктур в различных областях науки и техники стремительно растет. Углеродные наноструктуры активно используются и в нанобиотехнологиях [2], в частности, для создания подложек со сложной геометрией поверхности и химическими «приманками» [3].

В данном исследовании предлагается создание гофрированных подложек, покрытых чешуйками многослойного графена. Траектория частицы в сложном гофрированном микроландшафте будет зависит от точной геометрии (высота, шаг, угол гофра), скорости потока, вязкости жидкости и свойств самой бактерии. Поэтому важна геометрия поверхности подложек и свойства сродства с бактериями так называемые физические и химические «ловушки». Гофрированная поверхность в данной работе была получена по методике, описанной в работе [4] в основу которой положено появления неустойчивости Кельвина-Гельмгольца в жидкостях с разной плотностью. На первом этапе на межфазной границе графенсодержащая наножидкость на водной основе и расплавленный парафин была выращена наноструктурированная графеновая пленка [5]. На следующем этапе создается движения одной жидкости относительно другой, возникающая гидродинамическая неустойчивость приводит к появлению волн, которые зависят от различных параметров.

В результате эксперимента были получены подложки с различной глубиной и расстоянием между ребрами (рис). На рис. *а* получена структура подложки в виде впадин на рис. *б* – в виде горбов.

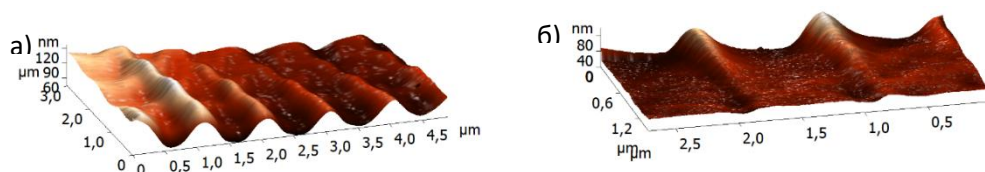


Рис. АСМ изображение поверхности подложки на парафиновой основе покрытых плёнкой изструктурированных многослойных графеновых чашук

Данная технология позволяет создавать подложки со сложной геометрией поверхности. Исследование выполнено за счет гранта РНФ № 25-71-00047

Список литературы:

1. Ю. А. Баимова, Р. Р. Мулюков, Графен, нанотрубки и другие углеродные наноструктуры; Российская академия наук. — Москва: РАН, 2018. — 211 с
2. Jayaprakash, N., Elumalai, K., Manickam, S., Bakthavatchalam, G., & Tamilselvan, P. (2024). Nano Materials Science.
3. Darini, R., Ahari, H., Khosrojerdi, A., Jannat, B., & Babazadeh, H. (2025). *Scientific Reports*, 15(1), 1007.
4. Пахаруков Ю. В., Шабиев Ф. К., Мавринский В. В., Сафаргалиев Р. Ф., Воронин В. В. (2019) *Письма в ЖЭТФ*, 109(9) 634-638.
5. Пахаруков Ю. В., Шабиев Ф. К., Сафаргалиев Р. Ф. (2023) Вестник ТюмГУ. Физико-математическое моделирование. Нефть, газ, энергетика. 9.(2). 23–38.

ПЛОСКИЕ ТЕПЛОВЫЕ ВОЛНЫ НА ГРАНИЦЕ РАЗДЕЛА ГРАФЕНОСОДЕРЖАЩАЯ НАНОЖИДКОСТЬ – УГЛЕВОДОРОД

Г.А. Малютенко¹, Ф.К. Шабиев^{1,2}, Ю.В. Пахаруков², А.В. Шабиева³, Р.Ф. Сафаргалиев²

¹Тюменский государственный университет ФГАОУ ВО ТюмГУ, Россия, Тюмень,

faridshab@mail.ru

²Тюменский индустриальный университет ФГБОУ ВО ТИУ, Россия, Тюмень

³Тюменский медицинский университет ФГБОУ ВО ТМУ, Россия, Тюмень

Одним из направлений создания наноструктурированных материалов – это получение их с использованием процессов самоорганизации. Новое междисциплинарное научное направление, изучающее процессы самоорганизации и самосборки с целью создания новых материалов с управляемой архитектурой, получила название наноархитектоника [1]. Высокой степенью к самоорганизации подвержены углеродные наночастицы [2-3]. В результате самоорганизации наночастиц углерода следует ожидать нелинейные закономерности в процессах теплопереноса. Так в работе [2] показано наличие тепловых неоднородностей в процессе роста наноструктурированной плёнки на основе графена и молекул углеводородов. Поскольку температура и теплоотвод — параметры, влияющие на конечную структуру наноструктурированной плёнки, важно детально изучить процессы теплопереноса в подобных системах. Итак, целью данной работы является изучение теплопереноса в тонких плёнках в процессе их формирования на границе графеносодержащая наножидкость – октан.

Для изучения процессов теплопереноса при росте плёнки была создана установка основным элементом которой является тепловизионная камера FLIR X6400sc, позволяющая фиксировать температуру до 0,1°C.

В результате наблюдения за процессами роста плёнок установлено появления тепловых волн (рис).

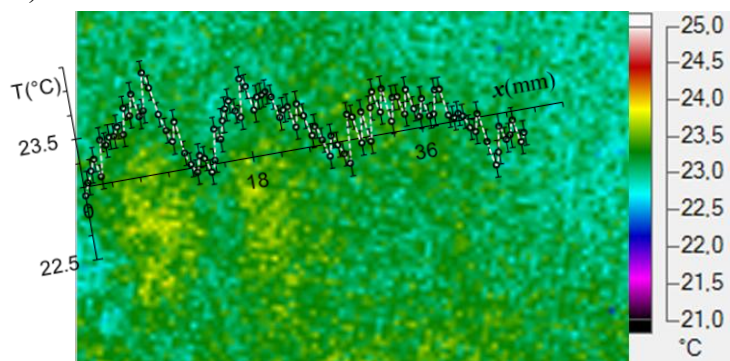


Рис. Тепловая картина области роста плёнки (на вставке – профиль поля температур по выделенной линии)

Длина волны тепловых неоднородностей составляет $\lambda_T = 14\text{mm}$, при температуре термостата 23°C. Следует отметить, что существуют области с температурой ниже термостата. При росте температуры длина волны увеличивается. Механизм образования тепловых волн связан с процессами самоорганизации, которые протекают с производством отрицательной энтропии.

Исследование выполнено за счет гранта РНФ № 25-71-00047

Список литературы:

1. K. Ariga, S. Watanabe, Mori T., J. Takeya, (2018) *NPG Asia Materials*, 10(4), 90-106.
2. Пахаруков, Ю. В., Шабиев, Ф. К., Сафаргалиев, Р. Ф., Галунин, Е. В. (2025) *ЖТФ*, 95(3), 565-574.
3. B. Ezdin, Y. Pakharukov, V. Kalyada, F. Shabiev, A. Zarvin, D. Yatsenko, V. Volodin, (2022) *Catalysis Today*, 397, 249-256.

ГИБРИДНЫЕ $sp-sp^2$ СЛОЕВЫЕ СОЕДИНЕНИЯ, СФОРМИРОВАННЫЕ НА ОСНОВЕ ГРАФЕНА L_{4-6-8}

Д.Д. Салыхова¹, В.В. Мавринский¹

¹ФГБОУ ВО “Магнитогорский государственный технический университет им. Г.И. Носова”, Магнитогорск, Россия

Научно-техническое развитие невозможно без новых материалов, обладающих уникальными физико-химическими свойствами. В этом направлении гибридные углеродные материалы имеют большое преимущество. Благодаря способности атомов углерода находится в трех различных гибридизированных состояниях, на их основе возможно образование линейных, плоскостных и трехмерных структур. Изменяя соотношение атомов, находящихся в различных гибридизированных состояниях, можно изменять свойства таких материалов.

Данные исследования являются продолжением серии работ по изучению гибридных $sp+sp^2$ углеродных структур [1-3]. Такие гибридные соединения имеют слоевую структуру и называются графинами. Взяв за основу структуру графенового слоя, можно, заменяя в нем связи на полииновые карбиновые цепочки построить различные графиновые слои. Ориентация заменяемых связей и их число будут определять структуру графиновых слоев, и, как следствие, их свойства [1,2].

В качестве исходного для теоретического построения графиновых слоев, были выбраны шесть структурных разновидностей 4-6-8 графена (L_{4-6-8a} , L_{4-6-8b} , L_{4-6-8c} , L_{4-6-8d} , L_{4-6-8e} , L_{4-6-8f}). Анализ показал, что на основе всех шести полиморфных модификаций графена L_{4-6-8} возможно формирование 51 графиновой структуры. Методом DFT-GGA была выполнена геометрическая оптимизация всех построенных графинов. При геометрической оптимизации часть графиновых слоев оказалась неустойчивой, и их структура трансформировалась в $sp-sp^2$ с уменьшением доли sp -гибридизированных атомов по отношению к исходной. Элементарные ячейки всех L_{4-6-8a} -, L_{4-6-8c} -, L_{4-6-8d} - и L_{4-6-8f} -граффинов являются прямоугольными. Для слоев L_{4-6-8b} - и L_{4-6-8e} -графина элементарные ячейки могут быть косоугольными и прямоугольными. Диапазон длин векторов элементарных трансляций варьируется от 4.2 до 29 Å, а углы между векторами для косоугольных ячеек варьируются от 95.2° до 160.8°. Для всех рассчитанных слоев графина удельная энергия связей, приходящаяся на один атом углерода, превышает удельную энергию для чистого графена, на основе которого они были построены. Таким образом, увеличение sp -гибридизированных атомов приводит к уменьшению устойчивости графиновых слоев, по сравнению с чистым графеном L_{4-6-8} . Наименьшее отличие удельной энергии графинового слоя от удельной энергии базового слоя графена наблюдается для γ_1 -структуры у которой только одна из трех связей для каждого sp^2 -гибридизированного атома заменена на карбиновую цепочку. Данная же структура имеет наибольшее значение энергии сублимации, поэтому должна быть наиболее устойчивой. Наименьшей удельной энергией связей обладает α - L_{4-6-8b} -графин.

Для части геометрически оптимизированных слоев были рассчитаны зонная структура и плотности электронных состояний. Установлено, что слои α - L_{4-6-8a} , γ_1 - L_{4-6-8a} и β_2 - L_{4-6-8b} должны быть узкозонными полупроводниками, а слои β_1 - L_{4-6-8a} , α - L_{4-6-8b} , β_3 - L_{4-6-8b} , β_4 - L_{4-6-8b} , β_1 - L_{4-6-8c} , β_1 - L_{4-6-8d} , β_3 - L_{4-6-8f} должны обладать проводящими свойствами.

Список литературы:

1. Belenkov M E, Kochengin A E, Chernov V M, Belenkov E A // Journal of Physics: Conference Series. – 2019. – Vol. 1399. – P. 022024.
2. Mavrinskii V V, Belenkov E A // Physical and chemical aspects of the study of clusters, nanostructures and nanomaterials. – 2020. – Vol. 12. – P. 446.
3. Belenkov E.A, Mavrinskii V.V. // Journal of Physics: Conference Series. 2020. V. 1431. P. 012.

ТЕПЛОПРОВОДЯЩИЕ СВОЙСТВА НАНОСТРУКТУРИРОВАННОЙ ПЛЁНКИ НА ОСНОВЕ ГРАФЕНА И МОЛЕКУЛ УГЛЕВОДОРОДОВ

С.А. Рахвалов¹, Ф.К. Шабиев^{1,2}, Ю.В. Пахаруков², А.В. Шабиева³, Р.Ф. Сафаргалиев²

¹Тюменский государственный университет ФГАОУ ВО ТюмГУ, Россия, Тюмень,
faridshab@mail.ru

²Тюменский индустриальный университет ФГБОУ ВО ТИУ, Россия, Тюмень

³Тюменский медицинский университет ФГБОУ ВО ТМУ, Россия, Тюмень

Углеродные наноструктуры поражают не только своим разнообразием, но и уникальностью своих свойств. Перспективность материалов на основе углеродных наночастиц не вызывает сомнений. Особый интерес представляют материалы, полученные при самоорганизации наночастиц углерода, так называемые наноструктурированные материалы [1]. Одним из способов наноструктурирования наночастиц углерода, в частности графеновых чешуек, это самоорганизация, происходящая на границе, раздела различных наножидкостей [2,3]. Итак, в данной работе изучаются теплопроводящие свойства наноструктурированного материала на основе малослойного графена и молекул углеводородов парафинового ряда ($C_{24}H_{50}$ – $C_{32}H_{66}$).

Получение тонкой наноструктурированной плёнки на поверхности парафина было произведено по методике, указанной в работе [3]. Получение графеновой наноструктурированной плёнки производилось на пластине парафина толщиной $d=2$ мм. После чего создавалась слоистая структура из пластинок парафина с плёнкой при помощи прессования в вакуумной среде, для исключения попадания пузырьков воздуха между слоями. Количество слоев $n = 10$. Далее из слоистого материала вырезался куб со стороной $a=20$ мм. После чего у данного слоистого кубика определялось теплопроводность в трех взаимно перпендикулярных плоскостях.

В результате получения слоистого материала был получен кубик со стороной $a=20$ мм изображенный на рис. Как можно видеть, в полученном слоистом материале слои расположены строго параллельно без инородных включений.

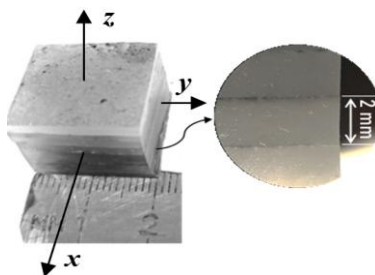


Рис. Куб из слоистого материала на основе наноструктурированной пленки многослойного графена и парафина

Измерение теплопроводности показывает установлена анизотропия теплопроводящих свойств. Измерение теплопроводности материала вдоль осей x , y и z составило значения $\alpha_x = (290.005 \pm 0.013) \text{ Вт/(м} \cdot \text{К)}$, $\alpha_y = (290.123 \pm 0.015) \text{ Вт/(м} \cdot \text{К)}$, $\alpha_z = (0.225 \pm 0.025) \text{ Вт/(м} \cdot \text{К)}$. Очевидно, что плёнка и материал, полученный на её основе, обладает анизотропией теплопроводящих свойств.

Исследование выполнено за счет гранта РНФ № 25-71-00047

Список литературы:

1. K. Ariga, S. Watanabe, Mori T., J. Takeya, (2018) *NPG Asia Materials* 10(4) 90-106.
2. Пахаруков, Ю. В., Шабиев, Ф. К., Сафаргалиев, Р. Ф., Галунин, Е. В. (2025). *ЖТФ*, 95(3), 565-574.
3. Пахаруков Ю. В., Шабиев Ф. К., Мавринский В. В., Сафаргалиев Р. Ф., Воронин В. В. (2019) Письма в ЖЭТФ, 109(9) 634-638.

АНОДНЫЙ МАТЕРИАЛ НА ОСНОВЕ КРЕМНИЙ-УГЛЕРОДНЫХ НАНОЧАСТИЦ ЯДРО-ОБОЛОЧКА

Б.С. Ездин¹, Ю.В. Пахаруков³, С.А. Васильев¹, Р.Ф. Сафаргалиев³, Ф.К. Шабиев^{2,3}

¹Новосибирский государственный университет ФГАОУ ВО НГУ, Россия,
Новосибирск

²Тюменский государственный университет ФГАОУ ВО ТюмГУ, Россия, Тюмень,

³Тюменский индустриальный университет ФГБОУ ВО ТИУ, Россия, Тюмень

faridshab@mail.ru

Использование кремний-углеродных наноматериалов в качестве анодного материала для литий-ионных аккумуляторов является более оправданным по сравнению с использованием чистого кремния. Причина тому быстрая деградация вследствие большого объемного расширения кремния при его зарядке [1]. Одним из способов борьбы с подобным явлением является использование «смирительной рубашки» в виде внешней оболочки [2]. Такой оболочкой выступают чешуйки графена. Подобные структуры получили название частицы ядро-оболочка.

Синтез структур Si@C проводили в циклическом реакторе сжатия, совмещающий пиролиз моносилана и легких углеводородов [4]. Реактор «поршень-цилиндр» (объем 0.3 л, частота 10 Гц) доказал эффективность для получения кремниевых наночастиц [5]. Вблизи верхней мертвой точки создаются высокие давление и температура (максимум 12 МПа). Для повышения температуры пиролиз вели в аргоне. Давление при совместном пиролизе составило 3.5–8.5 МПа, что выше, чем для чистого моносилана (2–5 МПа) [5].

В результате были получены наночастицы Si@C со средним диаметром 35 нм (рис. а), диаметром ядра 5÷10 нм (б).

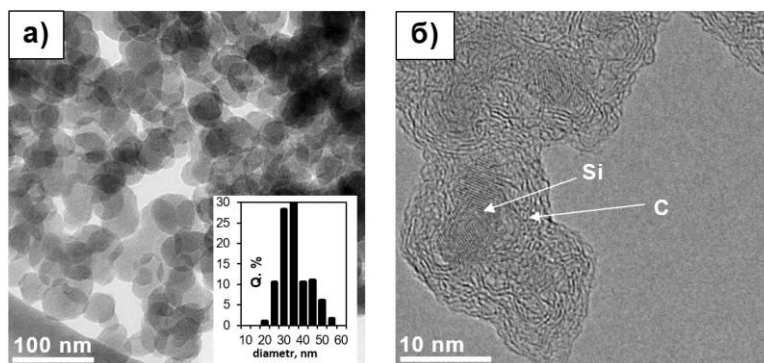


Рисунок - ТЭМ изображение наночастицы Si@C а) скопление части (на вставке распределение по размерам частиц) б) увеличенное изображение частицы Si@C, где: Si – ядро, C – оболочка

Полученные наночастицы Si@C являются подходящей основой для создания анодного материала литий-ионных аккумуляторов.

Исследование выполнено за счет гранта РФФИ № 25-71-00047

Список литературы:

3. A.F. Gonzalez, N.-H. Yang, R.-S. Liu, *J. Phys. Chem. C*, (2017), 121 (50), 27775
4. Ездин, Б. С., Васильев, С. А., Окотруб, А. В., Каляда, В. В., Столярова, С. Г., & Федоров, В. Е.. *Письма в ЖТФ*, (2023) 49(12), 39-42.
5. B. Ezdin, D. Yatsenko, V. Kalyada, A. Zarvin, A. Ichshenko, A. Nikiforov, P. Snytnikov, *Data Brief*, (2020), 28, 104868.
6. B.S. Ezdin, V.V. Kalyada, D.A. Yatsenko, A.V. Ischenko, V.A. Volodin, A.A. Shklyayev, *Powder Technol.*, (2021), 394, 996.

ПОЛУЧЕНИЕ АМОРФНЫХ И АЛМАЗОПОДОБНЫХ НАНОУГЛЕРОДНЫХ МАТЕРИАЛОВ**Клабукова А.Г.¹, Бердников Н.А.¹, Жеребцов И.С.¹, Савин В.В.¹**¹Балтийский федеральный университет им. И. Канта, Россия, г. Калининградagklabukova@stud.kantiana.ru

Для получения аморфных и алмазоподобных наноуглеродных материалов использовали механохимическую обработку в высокоскоростной шаровой мельнице РМ100 графита марки МПГ-7 (ТУ 48-4807-297-00). Обработка выполнялась при частоте вращения 1000 об/мин до 18 ч и дополнительно при 1500 об/мин до 10 часов.

Помимо изменения формы частиц от осколочной к сферической и уменьшения размера частиц до $1\div 2$ мкм 96,59 % была выявлена склонность микронных частиц к коагуляции, в то время как нанометровые частицы уже не участвуют в коагуляции.

Из анализа изменения химического состава следует, что с увеличением времени обработки увеличивается содержание кислорода и железа в порошках. Кислород попадает в частицы, предположительно, из остаточной атмосферы воздуха, а железо из материала шаров. Отметим, что после 8 ч МХО при 1500 об/мин произошло возгорание порошка, в котором, очевидно, помимо критического размера частиц было достаточное содержание кислорода и железа, как катализатора реакции окисления. В образце при большем содержании кислорода и меньшем содержании железа возгорание не происходит.

Ранее [1] было показано, что при обработке графита в вибромельнице E_{\max} наблюдалось выгорание именно аморфной составляющей графита после 12 часов обработки.

Рентгенографические исследования, выполненные на дифрактометре Discover D8 «Брукер» с рентгеновской трубкой Си-излучения, показывают изменение и смещение пиков графита, характерное как для образования алмазоподобного так и аморфного углерода. Рамановская спектроскопия доказывает, что в последнем образце алмазоподобный углерод преобладает над аморфным.

Таким образом, показана возможность получения аморфных и алмазоподобных наноуглеродных материалов при механохимической обработке в высокоскоростной шаровой мельнице РМ100 и высокоэнергетической вибрационной шаровой мельнице E_{\max} графита марки МПГ-7.

Работа выполнена за счет гранта Российского научного фонда № 25-72-31032 (<https://rscf.ru/project/25-72-31032>).

[1] Чайка В.А., Савин В.В., Савина Л.А., Осадчий А.В., Жеребцов И.С., Медведская П.Н. Применение механохимической обработки графита в планетарных шаровых мельницах для получения легированных кремнием углекомпозитных окатышей. - Известия высших учебных заведений. Серия «Химия и химическая технология», 2018, Т 61(11), с.38-42.

ПЛАЗМОННЫЕ СВОЙСТВА И АНОМАЛЬНАЯ ДИСПЕРСИЯ В ОПТИЧЕСКИХ СПЕКТРАХ ПОРИСТОЙ ЛАЗЕРНО-СТРУКТУРИРОВАННОЙ ПОВЕРХНОСТИ АНОДИРОВАННОГО ТИТАНА

А.А. Кострина¹, А.В. Цибульникова¹, И.И. Лятун¹, В.В. Брюханов¹, И.Г. Самусев¹

¹Балтийский федеральный университет имени И. Канта, Калининград, Россия, aakostrina@gmail.com

Повышение эффективности сенсоров, фотонных устройств, систем биомедицинского назначения и стелс-технологий требует создания материалов с контролируемой морфологией и оптическими свойствами. Благодаря сочетанию механической прочности, биосовместимости и выраженных оптических характеристик, лазерно-структурированный анодированный титан является перспективным материалом для указанных применений. Параметры анодирования и лазерного структурирования определяют морфологию, фазовый состав и электронную структуру оксидной пленки. В результате на поверхности формируются регулярные микро- и наноструктуры, выполняющие функции оптических резонаторов и определяющие плазмонные свойства материала. Целью работы являлось установление оптических процессов, связанных с распределением падающего излучения в лазерно-структурированной тонкой пленке TiO_2 с расположенными на ее поверхности нанопорами, сформированными наносекундным лазерным воздействием ($\lambda = 1064$ нм, $W = (3,2 \pm 0,2) \cdot 10^3$ Дж/см²) в условиях контроля энергетических параметров излучения и морфологических свойств поверхности.

Полученные в результате лазерного структурирования поверхности образцов характеризуются наличием массивов нанопор от 300 до 1100 нм (рис. 1а), в которых происходит резонансная локализация электромагнитного поля. В спектрах отражения выявлены минимумы, соответствующие возбуждению поверхностных плазмонов и интерференционных мод (рис. 1б). В спектрах диэлектрической проницаемости (ДП) обнаружена область аномальной дисперсии и локализации поля в области длины волны 625 нм (рис. 1в). Согласно расчетам, значение коэффициента Парселла для нанопоры составило 40, длина затухания плазмонных колебаний на поверхности и длина распространения поверхностных плазмонов составили 500 и 20 нм соответственно.

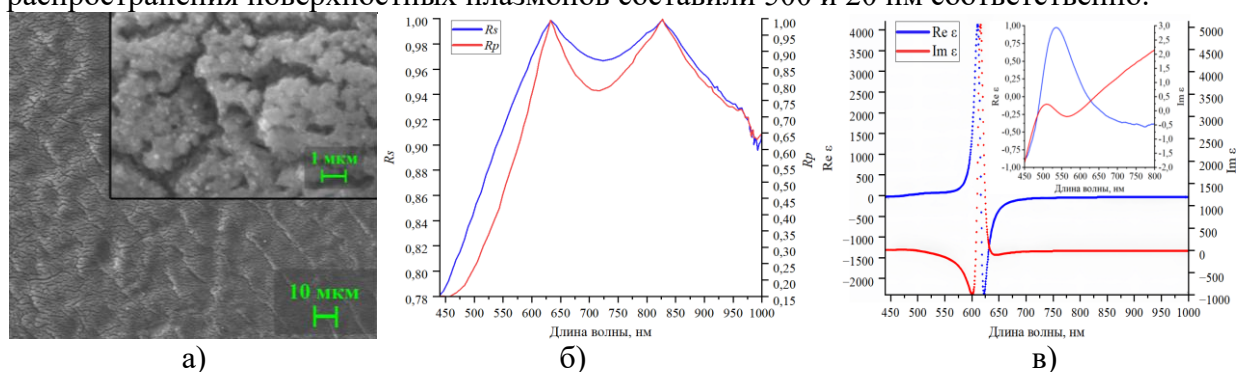


Рис. 1. Результаты исследования образца методами СЭМ и эллипсометрии: а) пористые образования по поверхности образца; б); спектры отражения поляризованного излучения; в) спектры ДП, вставка — спектры ДП поверхности анодированного титана

Решающее значение в полупроводниковую компоненту ДП имеет вклад, обусловленный сужением запрещенной зоны, однако наибольший вклад в экспериментально наблюдаемое поведение ДП вносит генерация резонансных плазмонных мод. Результаты исследования демонстрируют перспективность пористых лазерно-структурированных поверхностей анодированного титана для фотонных и сенсорных устройств, а также в качестве волноводных структур.

КОМПЛЕКСНЫЕ МЕТОДЫ ПОВЫШЕНИЯ ЭНЕРГЕТИЧЕСКОЙ ЭФФЕКТИВНОСТИ И ЭКСПЛУАТАЦИОННОГО РЕСУРСА ЛОПАСТНЫХ НАСОСНЫХ УСТАНОВОК

Э. К. Погосян¹, И. О. Стасюк¹

¹Балтийский федеральный университет им. И. Канта, Россия, Калининград.

Более 70 % нефти в России добывается с применением электропогружных лопастных насосных установок (УЭЛН), при этом энергетические затраты составляют до 50 % эксплуатационных расходов на подъём жидкости. Повышение энергетической эффективности и ресурса таких установок является ключевым направлением повышения эффективности добычи. Цель работы — экспериментальное обоснование эффективности геометрической оптимизации проточных каналов и нанесения алмазных покрытий для комплексного повышения КПД и надёжности лопастных насосов.

Геометрическая оптимизация проточной части. Метод направлен на снижение гидравлических потерь за счёт изменения формы каналов и плавности траектории потока. Теоретическое снижение потерь составляет до 10%, что частично подтверждено лабораторными испытаниями. Формирование плавных переходов на периферии рабочего колеса и направляющего аппарата (ступень Тип-1) снижает потери за счёт уменьшения вторичных течений.

Результаты испытаний: 3D-печатные ступени из ABS с подшипниками из поликарбоната показали повышение напора на 12–22 % по сравнению со стандартной ступенью ЭЦН-125, изготовленной из тех же материалов. Энергопотребление снизилось на 4 %, а напор увеличился до 22 %,

2. Поверхностная модификация узлов трения (опорных подшипников). Для повышения ресурса подшипников и торцовых уплотнений применяется нанесение алмазных покрытий методом PECVD на опорные шайбы из карбида кремния (SiC). Алмазный слой формирует на поверхности само-смазывающуюся аморфно-графитовую плёнку, снижающую адгезионный и абразивный износ. Пары трения SiC+алмаз-чугун «Нирезист» демонстрируют коэффициент трения на 83–86 % ниже, чем у пар SiC–чугун «Нирезист». При осаждении алмазной плёнки на поверхность карбидокремниевых подшипников скольжения достигается существенное увеличение их надёжности и ресурса за счёт снижения локальных температур и износа. Для повышения адгезии покрытия используется промежуточный слой из аморфного углерода (DLC).

Образцы с ультрананокристаллическим алмазом (UNCD) на SiC не показывают признаков износа после 240 ч непрерывной работы, что подтверждает значительное увеличение долговечности узлов трения.

Заключение

Комплексное применение методов геометрической оптимизации проточной части и нанесения алмазных покрытий на элементы трения позволило повысить КПД насосных ступеней до 10 %, снизить коэффициент трения и увеличить ресурс узлов трения более чем в 5 раз. Предложенные решения обеспечат рост общей надёжности и энергоэффективности УЭЛН.

Исследования выполнены в рамках выполнения работ по гранту РНФ № 25-72-31032 (<https://rscf.ru/project/25-72-31032>).

**ЛОКАЛИЗОВАННЫЕ РАЦИОНАЛЬНЫЕ РЕШЕНИЯ (1+2) НЕЛИНЕЙНОГО
УРАВНЕНИЯ КЛЕЙНА-ГОРДОНА****А.С. Трунин¹**¹Балтийский федеральный университет им. И. Канта, Россия, Калининград,
deletednyas@live.ru

Нелинейное уравнение Клейна-Гордона с кубической нелинейностью (модель «фи-четыре») является одним из самых популярных уравнений в теории поля и физике конденсированного состояния. В общем случае, при выполнении основных симметричных принципов, включая сохранение четности и общую форму лагранжиана для скалярного поля, в приближении слабого поля эта модель оказывается первым членом разложения потенциала по полевой переменной. Однако исследование соответствующих моделей затруднено неинтегрируемостью уравнения. Разумеется, в случае (1+1) можно найти стационарные решения (кинки), однако в физических приложениях значительно больший интерес играют динамические решения. Мы показываем, что (1 + 2)-нелинейное уравнение Клейна-Гордона с отрицательной константой связи допускает точное решение, которое представляет собой линейную суперпозицию плоской волны и несингулярного рационального солитона. Демонстрируется связь с многопараметрическими решениями НУШ типа «волны-убийцы». Мы показываем, что тот же подход позволяет построить решение с аналогичными свойствами для евклидовой модели ϕ^4 с нарушенной симметрией. Интересно, что это регулярное решение будет иметь инстантонный тип только в евклидовом пространстве с $D \leq 5$.

РАЗРАБОТКА АНОДНОГО МАТЕРИАЛА ДЛЯ NI-MH АККУМУЛЯТОРОВ НА ОСНОВЕ СОЕДИНЕНИЯ LaNi_5 С МАГНИТНЫМИ (ЗЖС ГРП Fe-Nd-B) И УГЛЕРОДНЫМИ (УНТ) ФУНКЦИОНАЛЬНЫМИ ДОБАВКАМИ

А.Г. Клабукова¹, Н.А. Бердников¹, И.В. Баринов¹, В.В. Савин¹, Л.А. Савина¹

¹Балтийский федеральный университет им. И. Канта, Калининград, Россия,
agklabukova@stud.kantiana.ru

Возрастающие потребности современных энергетических систем в эффективном накоплении, хранении и передаче энергии определяют необходимость совершенствования электрохимических источников тока, включая никель-металлгидридные аккумуляторы.

Целью данной работы является сравнительный анализ электрохимических параметров существующих анодных материалов Ni-MH аккумуляторов и выявление наиболее перспективных направлений их совершенствования и развития.

Анализ литературных научных и коммерческих данных показывает, что основными тенденциями на протяжении последнего десятилетия неизменно остаются следующие: оптимизация структурно-фазового состояния основного анодного сплава системы Ni-Co-TM1-TM2-La-REM, в том числе с применением технологии закалки из жидкого состояния (ЗЖС); применение новых разновидностей мезо- и нано- структурированного углеродного материала в качестве транспортных функциональных добавок; изменение термодинамических и кинетических условий протекания электрохимического процесса зарядки-разрядки в контактном слое анод – электролит. В последнем случае чаще всего используются внешние электромагнитные поля.

С учетом выявленных тенденций сформулированы следующие задачи для экспериментальных поисковых исследований: 1) изготовление серии анодных материалов на основе порошкового ЗЖС ГРП заданной фракции (в диапазоне +10 – 640 мкм) сплава системы Ni-Co-TM1-TM2-La-REM, где TM1=Al, TM2=Zr, REM=MM, который получен методом ЗЖС по технологии распыления струи расплава потоком инертного газа низкого давления (ГРП) с последующей механохимической обработкой в высокоэнергетической вибрационной шаровой мельнице Емах или планетарной шаровой мельнице РМ100 с добавками различных видов НУМ, в том числе МУНТ (многостенные углеродные нанотрубки) и ЗЖС ГРП (оптимального фракционного состава) магнитного сплава системы Fe-Nd-B; 2) изучение физико-химических свойств и структурно-фазового состояния синтезированных материалов; 3) изготовление лабораторных прототипов аккумуляторов и проведение цикла электрохимических испытаний (тестирования).

Будет проверена следующая рабочая гипотеза. При намагничивании анодного материала магнитожестькая функциональная добавка ЗЖС ГРП Fe-Nd-B формирует локальные остаточные магнитные поля в материале анода, которые влияют на электрохимические процессы при разрядке и зарядке аккумулятора. Данный эффект можно экспериментально зафиксировать при тестировании аккумуляторной ячейки. Варьируя тип и структурное состояние УНТ, которые влияют на проводимость, можно управлять функциональными свойствами анодного материала и, как следствие, потребительскими свойствами изделия (аккумулятора) в целом.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 25-72-31032, <https://rscf.ru/project/25-72-31032/>

СТАБИЛИЗАЦИЯ СУСПЕНЗИЙ УГЛЕРОДНЫХ НАНОТРУБОК БЕЛКАМИ ДЛЯ БИОМЕДИЦИНСКИХ ПРИМЕНЕНИЙ

С.И. Бирюков^{1,5}, А.Р.Покровская¹, А.Г. Матвеева^{1,2}, А.С. Богданова^{1,2}, А.Е. Томская^{1,3}, Д.В. Клинов^{1,2}

¹МФТИ, Физтех, 141700, Долгопрудный, Московская область,

²Федеральный научно-клинический центр Физико-химической медицины им. Лопухина
Федерального медико-биологического агентства, Москва,

⁴Кафедра микробиологии, биологический факультет, Московский государственный
университет им. М.В. Ломоносова,

⁵Балтийский федеральный университет им. И. Канта, Калининград
e-mail: biriukov.si@mipt.ru

В последнее время был предложен ряд перспективных применений углеродных нанотрубок в био-медицинской области, включая создание подложек и каркасов для обеспечения эффективного выращивания клеток. В некоторых случаях именно волокнистая структура углеродных нанотрубок в сочетании с электрической проводимостью этого материала обеспечивают выполнение требований, выдвигаемым к таким подложкам. В данной работе мы провели ряд исследований, направленных на разработку композитного материала из углеродных нанотрубок, покрытых белком – бычьим сывороточным альбумином. Было показано, что с помощью такого покрытия можно получать стабильные суспензии из углеродных нанотрубок в воде и в дальнейшем формировать различные плоские и квази-трехмерные структуры на их основе. Было показано, что с помощью изменения количества белка в суспензии, а также с помощью сшивания молекул белка при взаимодействии с глутаровым альдегидом, можно контролировать толщину белкового слоя. При этом также изменяется проводимость получаемых структур.

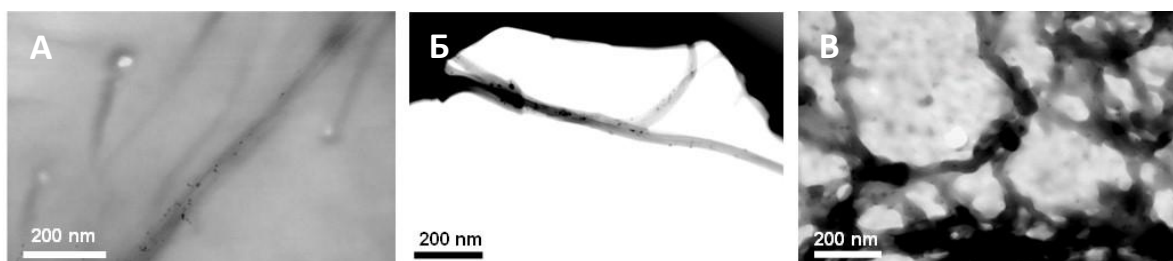


Рисунок 1. Изображения композитных структур нанотрубки+БСА А – после приготовления; Б – после удаления излишков белка; В – после сшивки белка с помощью глутарового альдегида.

На Рисунке 1 приведены изображения углеродных нанотрубок в сплошной пленке белка (А), после уменьшения количества белка в суспензии с помощью фильтрации и ресуспендирования (Б) и после сшивки молекул белка в суспензии с помощью глутарового альдегида (В). Видно, что после сшивки толщина белкового слоя составляет примерно 20-30 нм. При этом проводимость структур, изготовленных в одинаковых условиях уменьшается на порядок.

Работа была выполнена при поддержке РНФ 25-72-31032 – получение наноструктурированных материалов и их суспензий и Министерства высшего образования и науки Российской Федерации проекты FSMG-2023-0015 – анализ токсичности и биосовместимости.

САМОРАСПРОСТРАНЯЮЩИЙСЯ ВЫСОКОТЕМПЕРАТУРНЫЙ СИНТЕЗ (СВС): РАЗРАБОТКА АВТОНОМНЫХ ИСТОЧНИКОВ ТОКА И ВЫСОКОЭНЕРГЕТИЧЕСКОГО ИЗЛУЧЕНИЯ

В. Г. Саламатов¹, В. В. Федотов¹

¹Балтийский федеральный университет им. И. Канта, Россия, Калининград,
VGSalamatov@kantiana.ru

Волновые быстропротекающие реакции горения металлсодержащих конденсированных систем, характеризующиеся величиной скорости распространения более 0,5 см/с и температурой во фронте более 1500 К, являются ключевыми в контексте современной «зелёной» энергетики, металлургии и ракетнокосмической техники.

Проведены экспериментальные исследования, направленные на изучение возможности применения лент, изготовленных методом холодной прокатки порошковых смесей Ti+1.7В и Fe₃O₄+1.5Ti, в качестве ячеек резервных источников тока (батарей высокотемпературных гальванических элементов) для питания различных приборов и устройств в экстремальных условиях эксплуатации. В результате экспериментов было установлено, что ячейки-ленты толщиной 200 мкм демонстрируют способность генерировать электрическое напряжение в процессе горения в магнитном поле (0.5 Тл), превышающее 1,5–2,5 В. Длительность генерирования электрического тока составила более 10 секунд. Полученные характеристики превосходят характеристики применяемых на данный момент батарей конструкций типа: Zr/CuO-LiF/CaF₂/MgF₂-Zr/CuO. Прямое преобразование химической энергии энергетических конденсированных систем в электрическую энергию в режиме горения многослойных конденсированной энергетической системы является новым направлением высокотемпературной электрохимии.

Экспериментально исследовано высокотемпературное горение порошковых смесей MoO₃-1.5Al, Ti-2В и реакции ламинатных композитов Ti-2В, Ti-C, 5Ti-3Si. Методом фотографической фотометрии установлено, что эмиссионный спектр исследуемых процессов простирается вплоть до мягкого рентгеновского диапазона длин волн. Рентгеновское излучение детектировали с использованием фотометрического пакета, состоящего из фотопленки RAR2497 и окружающих защитных слоев (смотреть рисунок 1), а также с использованием сцинтилляционного детектора SCSD-4.01 (NaI(Tl)). Обсуждён вероятный механизм возбуждения рентгеновского излучения. Показано, что представленные результаты демонстрируют высокий уровень новизны и актуальности, что требует проведения дальнейших исследований в данной области.

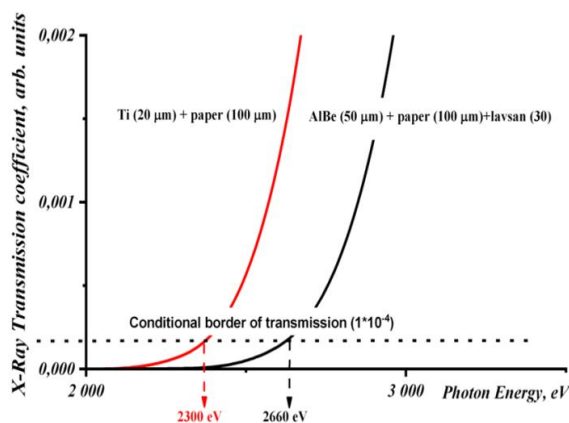


Рисунок 1. Рассчитанные характеристики прохождения фотонов через защитные экраны, использованные в экспериментах (согласно данным В.Л. Henke, Е.М. Gullikson, J.C. Davis, Atomic Data and Nuclear Data Tables, 54 (2) (1993) 181-342).

Работа выполнена при поддержке программы развития БФУ им. И. Канта - «Приоритет 2036», проекта 1086-Л-25

ИЗУЧЕНИЕ ВЛИЯНИЯ НАНОЧАСТИЦ ЗОЛОТА НА ПРОЦЕСС ДИФфуЗИИ АМИНОКИСЛОТЫ L-ТРИПТОФАНА В ВОДНОМ РАСТВОРЕ МЕТОДОМ ДИФфуЗИОННО-УПОРЯДОЧЕННОЙ ^1H ЯМР-СПЕКТРОСКОПИИ

М.Л. Смирнов¹, Г.С. Куприянова¹

¹Балтийский федеральный университет имени И. Канта, Россия, Калининград
smirnov.mark2015@yandex.ru

Использование наночастиц (НЧ) и наноматериалов в медицине значительно расширило их потенциал для лечения заболеваний, в разработке новых фармацевтических препаратов, систем доставки лекарств [1]. Особый интерес вызывает функционализация металлических наночастиц (НЧ) аминокислотами. Как показали исследования, присутствие НЧ золота в водном растворе L-тиразина приводит как к изменению динамических свойств, так и конформации молекулы [2,3]. Целью данной работы было изучить влияние наночастиц золота (Au НЧ) различной геометрической формы на процесс диффузии L-триптофана в водном растворе (BLT), а также в присутствии стабилизатора НЧ. Для решения данной проблемы использовался метод диффузионно-упорядоченной ^1H ЯМР-спектроскопии, позволяющий оценить коэффициенты диффузии различных компонент в многокомпонентном растворе [3]. Концентрация водного раствора LT была 10^{-3} моль/л. К BLT добавлялся раствор, содержащий НЧ. Исследовалось влияние Au НЧ в сферической форме, в форме стержней и звезд на динамические свойства LT.

Двумерные спектры ^1H NMR DOSY были получены на ЯМР-спектрометре Varian 400 MHz в магнитном поле $B = 9,04$ Тл с использованием импульсной последовательности Doneshot. Спектры были сняты с подавлением сигнала воды со следующими параметрами: диффузионная задержка - 50,0 ms, релаксационная задержка – 1 секунда, спектральная ширина – 16 ppm, количество накоплений – 512.

Результаты экспериментов по определению коэффициентов диффузии образцов триптофана в присутствии НЧ представлены в Таблице 1. Из таблицы видно, что наибольший эффект на динамические свойства тиразина оказывают AuНЧ в форме звезд. Также следует отметить заметное влияние на процесс диффузии стабилизатора НЧ (цетилтриметиламмоний бромид).

Таблица 1. Диапазоны химического сдвига и коэффициента диффузии для протона H21, находящегося в гетероциклическом фрагменте молекулы триптофана

	Диапазон химического сдвига , ppm	Диапазон коэффициента диффузии, * $10^{-10}\text{ м}^2 / \text{с}$
Водный раствор триптофана	7,090 – 7,100	6,276 – 6,850
Триптофан + СТАВ	7,108 – 7,127	5,218 – 5,521
Триптофан + Au Rods	7,142 – 7,158	5,486 – 5,925
Триптофан + Au Stars	7,093 – 7,107	5,628 – 5,965

Литература

1. Baig, N., Kammakakam, I., & Falath, W. (2021). Materials Advances, 2(6), 1821–1871. doi:10.1039/d0ma00807a
2. F.Ramezani • M. Amanlou , H.Rafii-Tabar Amino Acids. 46(4) 2013 p. 911-920 DOI 10.1007/s00726-013-1642-6
3. М. Smirnov, G. Gamov, A. Zyubin, A. Zozulya, I. Lyatun, E. Demishkevich, G. Kupriyanova, I. Khodov. *Journal of Molecular Liquids*. 2024 420(19):126822 DOI: [10.1016/j.molliq.2024.126822](https://doi.org/10.1016/j.molliq.2024.126822)

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 25-72-31032 (<https://rscf.ru/project/25-72-31032>).

**ЛОКАЛИЗОВАННЫЕ РАЦИОСИНТЕЗ И ИССЛЕДОВАНИЕ КАТАЛИЗАТОРОВ
МЕТАНИРОВАНИЯ CO₂ НА ОСНОВЕ НИКЕЛЯ И УГЛЕРОДНЫХ НАНОТРУБОК****А. Тюрина^{1 2}**¹Новосибирский государственный университет, Россия, Новосибирск²Институт катализа им. Г.К. Борескова СО РАН, Россия, Новосибирск

Глобальное потепление считается одной из важнейших проблем, с которыми сталкивается человечество. Повышение концентрации CO₂ в атмосфере на 25% в течение последних 60 лет приводит к росту температуры на Земле из-за парникового эффекта. Среди способов решения проблемы сокращения выбросов CO₂ многообещающим направлением может быть использование технологии улавливания, транспортировки, хранения и использования CO₂ (англ. CCUS). Особое внимание уделяется химической переработке диоксида углерода в полезные продукты. Одним из наиболее многообещающих подходов к данному процессу является метанирование CO₂ [1]. Помимо того, что эта технология позволяет уменьшить количество углекислого газа в атмосфере, она также представляет интерес, как система накопления возобновляемой энергии, основанная на преобразовании энергии в синтетический природный газ. Интеграция электролиза воды и метанирования CO₂ является высокоэффективным способом накопления энергии, вырабатываемой из возобновляемых источников энергии [2]. В настоящее время в реакции каталитического метанирования CO₂ активно исследуются катализаторы на основе никеля и различных носителей [3]. В данной работе были синтезированы и исследованы никелевые катализаторы метанирования CO₂ на основе многослойных углеродных нанотрубок. Серия катализаторов с различным содержанием никеля была исследована в реакции метанирования CO₂. Была проанализирована зависимость активности катализатора от массовой доли Ni. Эту активность сравнивали с активностью промышленного катализатора метанирования НИАП-07. Установлено, что активность катализатора с массовой долей никеля 5,9% ниже, чем активность катализаторов с содержанием Ni 19,6% и 30,1%, активности последних, в свою очередь, различаются незначительно. Обнаружено, что активности катализаторов с содержанием Ni 19,6% и 30,1% существенно выше, чем активность промышленного катализатора НИАП-07. Полученный результат показывает перспективность подхода к использованию нанотрубок в качестве носителей для катализаторов метанирования, закладывает основу для проведения дальнейших исследований в этом направлении.

[1] F. M. Mota, D. H. Kim. From CO₂ methanation to ambitious long-chain hydrocarbons: Alternative fuels paving the path to sustainability // *Chem. Soc. Rev.* 2019. Vol. 48, №1, P. 205–259.

[2] Q. Deng, X. Ling. et al. CCS and CCUS Technologies: Giving the Oil and Gas Industry a Green Future. *Front. Energy Res.* 2022. Vol. 10. P. 2020–2023.

[3] W. Wang, J. Gong. Methanation of carbon dioxide: An overview // *Front. Chem. Eng. China.* 2011. Vol. 5. № 1. P. 2–10,.

Благодарности: научному руководителю, к.х.н., доценту В.С. Деревщикову