ФИЗИКО-ТЕХНИЧЕСКИЙ ИНСТИТУТ
ВОЛГОГРАДСКОГО ГОСУДАРСТВЕННОГО УНИВЕРСИТЕТА



НАНОТЕХНОЛОГИИ И НАНОМАТЕРИАЛЫ: СОВРЕМЕННОЕ СОСТОЯНИЕ И ПЕРСПЕКТИВЫ РАЗВИТИЯ

СБОРНИК ТЕЗИСОВ VI МЕЖДУНАРОДНОЙ НАУЧНО-ТЕХНИЧЕСКОЙ КОНФЕРЕНЦИЯ

г. Волгоград28–30 апреля 2026 года

Волгоград 2026

УДК 620.3
ББК 30.3
Н25

Организационный комитет конференции:

Калинина Алла Эдуардовна – председатель, ректор Волгоградского государственного университета, доктор экономических наук, профессор;

Запороцкова Ирина Владимировна – заместитель председателя, профессор кафедры судебной экспертизы и физического материаловедения Волгоградского государственного университета, доктор физико-математических наук, профессор;

Говиндхасами Муругадосс – доцент (научный сотрудник) центра нанонауки и нанотехнологий Международного исследовательского центра Научно-технического института Сатьябамы (Ченнаи, Индия);

Михайлова Валентина Александровна – директор физико-технического института Волгоградского государственного университета, доктор физико-математических наук, профессор;

Борознин Сергей Владимирович – заведующий кафедрой судебной экспертизы и физического материаловедения физико-технического института Волгоградского государственного университета, доктор физико-математических наук, доцент;

Борознина Наталья Павловна – профессор кафедры судебной экспертизы и физического материаловедения физико-технического института, доктор физико-математических наук, доцент.

В данном сборнике представлены тезисы научных трудов VI Международной научно-технической конференции «Нанотехнологии и наноматериалы: современное состояние и перспективы развития», состоявшейся 28–30 апреля 2026 года.

ISBN 978-5-9669-

© Авторы статей, 2026
© ФГАОУ ВО «Волгоградский государственный университет», 2026

Содержание

Сравнительная оценка влияния углеродных наномодификаторов разной природы на свойства эпоксидных полимеров **(Абдрахманова Л.А., Валиева Д.М., Хозин В.Г., Низамов Р.К.**)……	8
Исследование сенсорных свойств модифицированных азотом углеродных нанотрубок на оксид азота (**Алимов В.Н., Борознин С.В.**)……..	10
Низкоомные газовые сенсоры на основе тонких плёнок ITO для работы в жёстких условиях эксплуатации (**Алмаев А.В., Чикиряка А.В., Яковлев Н.Н.**)……..…….	12
Углеродосодержащие бислойные системы: первопринципное моделирование в атомноподобном базисе (**Аникина Е.В., Каплун М.В, Бескачко В.П.**)……..	15
Исследование кинетики адсорбции органических красителей на активированном биоугле из растительных отходов переработки рапса (**Бадин Д.А., Буракова И.В., Бураков А.Е., Баранов Д.А.**)…….	16
Углеродные нанотрубки на метеоритном металле: синтез и сравнительный анализ с внеземными наноструктурами (**Бахмутова А.С., Гроховский В.И., Яковлев Г.А., Панкрушина Е.А**.)…….....	18
Потенциал использования терморасширенного графита в качестве углеродного сорбента (**Берестнева Ю.В., Ракша Е.В., Ересько А.Б., Филимонов Д.А**.)……..	20
Текстурные траектории изменения анизотропии Ni-нанопленок (**Берестова С.А., Серков К.В.**)…….	21
Функциональные свойства наноструктурированных пленок PbS, содопированных лантаном и йодом (**Боков Т.С., Зарубин И.В**.)…….	22
Влияние последовательности кислотной очистки и термоокисления детонационного наноалмаза на устойчивость его водных дисперсий (**Болатов А., Водолажский В.А., Ермакова Л.Э., Волкова А.В.**)…….	24
Сравнение газофазного и жидкометаллического методов получения углеродных нанотрубок термокаталитическим разложением метана (**Васин Д.А., Кудинов И.В.**)	26
Методика металл-индуцированной лазер-стимулированной кристаллизации кремниевых пленок на гибких полимерных подложках (**Сердобинцев А.А., Волковойнова Л.Д.,Вениг С.Б.**)……..…..	28
Исследование фильтрующей способности мембран из углеродных нанотрубок, модифицированных наночастицами TiO2 (**Виноградова Л.М., Нежданов А.В., Шестаков Д.В., Скрылев А.А., Ершов А.В., Машин А.И., De Filpo G., Baratta M**.)…….	30
Исследование свободной поверхностной энергии на границе раздела сред: фторид магния MgF2-углеродные нанотрубки (**Воробьев А.С., Каманина Н.В**.)…….……	32
Фотокаталитическое производство водорода с использованием титансодержащих нанотрубок со структурой хризотила Mg3Si2O5(OH)4, синтезированных с добавлением SiO2·nTiO2 (**Гатина Э.Н., Храпова Е.К., Курносенко С.А., Осминина А.А., Жидоморова К.А.**)……..……	34
Нейроинтерфейсы на основе лазерно-индуцированных углеродных наноматериалов (**Герасименко А.Ю., Мурашко Д.Т., Курилова У.Е., Савельев М.С.**)……..…….	36
Углеродные композиционные наноматериалы для биоинтегрированных электронных устройств (**Герасименко А.Ю., Куксин А.В., Мурашко Д.Т., Попович К.Д., Сучкова В.В., Курилова У.Е., Савельев М.С., Шаман Ю.П**.)…..…	38
Электроды на основе наноструктур из углеродных нанотрубок и графена для биомедицинских систем (**Герасименко А.Ю., Куксин А.В., Морозова А.С.**)…..…..	40
Цементы низкой водопотребности, модифицированные наноразмерными добавками (**Гуляков Е.Г., Хозин В.Г**.)…….	42

Мицеллярные системы доставки этопозида с редокс-чувствительным высвобождением на основе гидрофобизированной гиалуроновой кислоты (**Дредунова А.А., Поливанова А.Г**.)…….……	44
Моделирование спиновой проводимости хиральных нанотрубок и проводов (**Дьячков П.Н.**)…….	46
«Умный» герметик с углеродными нанотрубками, меняющий электросопротивление при нарушении целостности шва (датчик разгерметизации) (**Жаилканов А.С., Протопопова Ю.Д.**)…….	49
Деградация проводимости наноструктурированного анатаза: автомодельный характер кинетики обеднения ансамблей подвижных носителей заряда (**Зимняков Д.А., Алонова М.В., Кочкуров Л.А., Славнецков И.О.**)……...……	51
Влияние железа на структуру и свойства металлоуглеродных нанокомпозитов на основе цеолитоподобных каркасов ZIF-67 (**Зорин А.В.**)…….....	53
Диагностика проводящего дефекта в фотонно-кристаллической структуре с помощью циркулярно-поляризованной электромагнитной волны (**Иванов П.С., Яцышен В.В.**)……..…….	55
Получение гибридных материалов на основе магнитных наночастиц и восстановленного оксида графена (**Иони Ю.В., Ибрагимова В.Р., Сапков И.В., Амосов А.Г.**)……..….....	57
Химическая модификация поверхности первичных частиц углеродных кластеров - ключ к формированию устойчивых суспензий в полярных средах (**Калинин А.В., Возняковский А.П.**)……...…..	59
DFT моделирование графеновых нанолент (**Каплун М.В., Миронова Т.О., Бескачко В.П**)……...……	61
Наноразмерный углеродный композит: формирование, свойства и применение (**Каратышова Т.Я., Ткачев Д.В., Глуховской Е.Г**.)……..…….	62
Композитная пленка на основе триангулированного борофена и борной нанотрубки: исследования электронных свойств методом DFT (**Колосов Д.А., Глухова О.Е.**)…....	64
Устойчивость гидрозоля отрицательно заряженного детонационного наноалмаза в растворах ионогенных поверхностно-активных веществ (**Коняева Е.А., Лопатина Е.С., Ермакова Л.Э., Волкова А.В**)……	66
Перспективы использования углеродных точек при формировании электрохимического сенсора на гидроксиламин (**Косаренина М.М.**)……..	68
О влиянии подложек на поверхностную адсорбцию бора на графене и углерода на борофене (**Кочаев А.И**.)…….	70
Влияние режимов ультразвукового диспергирования углеродных нанотрубок на электрохимические свойства углеродных покрытий титана (**Кузнецова Е.А., Ефремова К.Д., Герасименко А.Ю**.)……..	72
Повышение физико-механических и трибологических свойств полимерных композиционных материалов для fdm-печати: проблемы и перспективы (**Кунафина М.Т., Протопопова Ю.Д.)**…….	74
Управление резистивными и емкостными свойствами структур Ti/HfOx/TiN для нейроморфных применений (**Кучумов И. Д., Мартышов М. Н., Форш П. А**.)……..	76
Частотно-селективное демультиплексирование спиновых волн в крестообразной ЖИГ-структуре с кольцевым микрорезонатором (**Манышева А.А., Яснев Н.Ю., Садовников А.В**.)……...	78
Локализованные спиновые волны в гетероструктурах на основе двухслойных пленок железо-иттриевого граната (**Мартышкин А.А., Бегинин Е.Н., Садовников А.В.)**……..…….	80
Новый способ модификации материалов наночастицами серебра (**Матульская Е.И., Ворнакова Е.А., Казанцев С.О., Ложкомоев А.С.**)……	82

Выпрямляющие контакты для перспективной наноэлектроники (**Мезенцева Ж.В., Дорошкевич А.С., Ибрагим Махмуд, Перез Энтони, Б.Л. Оксенгендлер**)……..	84
Наноматериалы на основе антител против антигенов вируса гриппа А (**Морозова О.В., Исаева Е.И., Образцова Е.А., Клинов Д.В**)…….	85
Формирование массива мемристоров Ti/MoS2/Si на подложке высоколегированного кремния (**Мотовило Т.А., Ильин А.С**.)…….	86
Влияние марганца на структуру и свойства металлоуглеродных нанокомпозитов на основе цеолитоподобных каркасов ZIF-67 (**Муратов Д.Г., Кожитов Л.В., Зорин А.В.**)…….	88
Моделирование спектра металл-усиленной флуоресценции самоподобных коллоидных наноантенн для детекции одиночных молекул (**Зарьков С.В., Якунин А.Н., Аветисян Ю.А., Акчурин Г.Г., Тучин В.В.**)……..……	90
Термоиндуцированная кристаллизация SiOx как механизм оптимизации резистивного переключения (**Гусев Д.В., Брук Э.Л., Кукушкин А.О.**)……..……..	93
Исследование импедансной спектроскопии в тонких пленках углеродных квантовых точек (**Ненашев Г.В., Алешин А.Н.**)……..	95
Сравнительный анализ методов эксфолиации графита(**Нечушкин С.Б.,Козлов В.В**.)	97
Применение наноструктурированных графеновых метаповерхностей для электрического управления рассеянием терагерцового излучения (**Никитин М.С., Макеева Г.С.**)……...	99
Управление преобразованием поляризации терагерцовых волн с помощью магнитоплазмонных графеновых метаповерхностей (**Никитин М.С., Макеева Г.С**.).	101
Нетканые полимерные волокнистые материалы на основе биополимера, модифицированного оксидом графена (**Ольхов А.А., Карпова С.Г., Зернова Ю.Н., Филатова А.Г., Иорданский А.Л.)**…….	103
Исследование влияния магнитного поля на свойства магнитной жидкости с агрегатами наночастиц магнетита (**Орехова С.М., Закинян А.Р.**)…..……	105
Математическая модель на основе экспериментальных данных для прогнозирования скорости испарения бария с поверхности катода М-типа, модифицированного наноуглеродом (**Петрунин А.А., Крачковская Т.М., Глухова О.Е.**)……..	106
Исследование зависимостей фотокаталитических свойств и фотоактивности в зависимости от температуры электролита и последующей термической обработки (**Прудникова М.Ю., Бутманов Д.Д., Савчук Т.П.**)……..……..	108
Эллипсометрический контроль динамики роста толщины пленки оксидов меди. анализ динамики нарастания оксидного слоя на медной подложке с применением неразрушающего контроля (**Годляускас О.В., В.В. Яцышен В.В.**)…...……	110
Электрохимическое получение оксида графена: физико-химические и сорбционные свойства (**Круглова А.С., Дмитриева Е.Д.**)……..……	112
Влияние точечных дефектов на электронные и электрические свойства графен-нанотрубных композитных пленок (**Прудникова Е.А., Слепченков М.М.**)…..……...	114
Спектрально-селективное управление передачей поверхностных спиновых волн в двухслойной ЖИГ-структуре с локально нагретой областью (**Пташенко А.С., Садовников А.В.**)……..……...	116
Модификация электроизоляционного компаунда наноуглеродными структурами для улучшения его физических свойств (**Крачковский С.В., Пузанов А.М., Крачковская Т.М., Калистратов Н.А.**)……..…….	118
Модификация электрода нейроинтерфейса методом лазерной абляции и нанесение гибридного углерод-биополимерного покрытия (**Савельев М.С., Круковский Н.С., Мурашко Д.Т., Герасименко А.Ю.**)……..	120
Углеродные наноструктуры в современных устройствах хранения энергии (**Савилов С.В., Архипова Е.А., Иванов А.С**.)……	122

Автоэмиссионные свойства катодов на основе ПАН-волокон и УНТ-нитей (для МФТИ) (**Саи Тхвин Наинг Зо., Шешин Е.П.**)……	124
Молекулярно-динамическое моделирование термоиндуцированного воздействия в наночастицах Cu-Pt-Pd (**Колосов А.Ю., Соколов Д.Н., Непша Н.И., Митинев Е.С., Сдобняков Н.Ю.**)……..	126
Исследование взаимодействия функционалированных атомом золота унт (6,0) и (6,6) с молекулами ацетона и углекислого газа (**Сергеев Д.Ф., Борознина Н.П, Запороцкова И.В.**)……..…….	127
Моделирование взаимодействия дисульфида молибдена с латентными следами рук (**Сердюкова Д.С., Ермакова Т.А., Васильев В.А.**)…….	129
Исследование процесса поверхностного модифицирования углеродных нанотрубок оксидом олова (**Сизоненко В.В., Борознин С.В., Кислова Т.В., Смирнов К.О**.)….....	131
Получение углеродных наноструктур плазмохимическими методами (**Смовж Д.В., Скирда М.С.**)……..……..	133
Влияние вакансий на адсорбцию органических молекул на однослойном карбиде кремния (**Созыкин С.А., Барташевич Е.В.**)……..……..	134
Температурная динамика Au25(SR)18: молекулярно-динамическое моделирование (**Созыкина Е.Р., Бескачко В.П.**)……..……..	136
Электрофизические свойства углеродных нанотрубок при высоких давлениях (**Соколовский Д.Н., Волкова Я.Ю.**)……..…	138
Пространственно-частотная маршрутизация спиновых волн в магнонной структуре с геометрической симметрией 2-го порядка (**Солянов А.А., Жумабекова К.Е., Садовников А.В.**)……....	140
Нанокомпозиционный аэрогель, декорированный наночастицами железа, для удаления органических красителей малахитового зеленого и метанилового желтого (**Тимиргалиев А.Н., Зайцев Д.А., Бураков А.Е., Буракова И.В., Кузнецова Т.С.**)..	142
Разработка автоэмиссионных катодов на основе наноструктурированных углеродных фольг (**Тхет Хму Маунг, Шешин Е.П.**)……..……..	144
Некоторые пути повышения эффективности мемристивных структур для нейроморфных вычислительных систем (**Форш П.А., Ильин А.С., Мартышов М.Н., Форш Е.А.**)……..…....	146
Сравнительный анализ углеродных и неуглеродных нанотрубок на основе квантово-химического моделирования (**Ходжамаммедов М.М.,Татова О.Б., Тарханова Г.Г.**)	147
Квантово-химическое исследование графена и его производных для применения в наноэлектронике (**Аманова О.Г., Шохрадов Б., Сухрабов С.С.**)…….…….	148
Применение углеродных и неуглеродных наноструктур в современных технологиях: сравнительный анализ свойств и функциональных возможностей (**Ходжамаммедов М.М., Рашидов М.М., Реджепов К.М.**)…….	150
Применение нанотехнологий в биотехнологии: наноматериалы для диагностики и медицины (**Аманова О.Г., Рашидова Н.Р., Рахманов Ы.А.**)…….…….	151
Электрохимический синтез поверхностно модифицированной оксидами переходных металлов углеродной бумаги как электродного материала для суперконденсаторов (**Храменкова А.В., Мощенко В.В.**)……	152
Получение функционализированного графита из стержней отработанных Zn-C батарей (**Чердакли Ю.П., Бугорская Д.И., Карташинская Е.С., Глазунова В.А., Волкова Г.К., Бурховецкий В.В., Горбатко С.В.**)…….…….	154
Молекулярно-динамическое исследование процесса коалесценции металлических наночастиц (**Череповская А.А., Рыжкова Д.А., Гафнер Ю.Я.**)…….……...	156
Получение устойчивых водных дисперсий фуллерена С60 методом замены растворителя и изучение их свойств (**Шакирова Л.Ф., Гатауллин А.Р., Богданова С.А.**)…….	158

Разработка и исследование характеристик автокатодов для электронных пушек (**Чит Фон Паинг, Шешин Е.П.**)……..……	160
Углеродные модификаторы трения (**Шилов М.А., Смирнова А.И., Савилов С.В., Дьячкова Т.П., Столбов Д.Н., Усольцева Н.В.**)……	161
Квантовая ёмкость двумерных плёнок графен/$LiCoO_2$ при различном содержании углерода (**Шунаев В.В., Петрунин А.А., Глухова О.Е.**)…….……	164
Разработка программы для решения задачи о прохождении квантовой частицы через потенциальный барьер произвольной формы методом матриц переноса (**Эль Занин А.Р., Яцышен В.В.**)……..……	166
Влияние состава и морфологии углеродных наноматериалов на антикоррозионные свойства композитных покрытий на основе поливинилхлорида (**Яковлев С.В., Суслова Е.В., Иванов А.С.**)……..……..	168
Моделирование эволюции лазерных пучков в углеродных нанотрубках с примесями в условиях двухфотонного поглощения (**Янюшкина Н.Н.**)……..……...	170
Влияние ориентации магнитного поля на резонансные свойства интегрированной магнонной структуры с кольцевым ЖИГ-резонатором (**Яснев Н.Ю., Манышева А.А., Жумабекова К.Е., Садовников А.В.**)……..……	172
Гибридный алмазографитовый нанокомпозит для детектирования газов (**Вениг С.Б., Синев И.В., Яфаров Р.К.**)……	174
Исследование сенсорных свойств модифицированных азотом углеродных нанотрубок на оксид азота (**Алимов Н.Н., Борознин С.В., Григорьев А.Д.**)……..	177
Исследование возможности модифицирования углеродной нанотрубки атомом водорода (**Гончаров М.В., Борознин С.В., Григорьев А.Д.**)……	179
Исследование адсорбции атомарного кислорода на поверхности углеродной нанотрубки модифицированной азотом (**Мельников А.А., Борознин С.В., Григорьев А.Д.**)……..……..	181
Исследования влияния вредных газов на комплекс наносистемы и прилежащей к ней карбоксильной группы (**Шабунин А.В., Борознин С.В., Григорьев А.Д.**)……...	183
Нутационные колебания в ферромагнитных пленках (**Мартышкин А.А., Садовников А.В.**)	185
Нелинейный отклик графена на электромагнитную волну в модели сильной связи (**Давидович М.В.**)	187
Полюсной модели атома 20 лет, этапы ее развития (**Стрекалов С.Д.**)	189

Сравнительная оценка влияния углеродных наномодификаторов разной природы на свойства эпоксидных полимеров

Абдрахманова Л.А. [1], ***Валиева Д.М.*** [1], ***Хозин В.Г.*** [1], ***Низамов Р.К.*** [1]

e-mail: laa@kgasu.ru
[1]*ФГБОУ ВО «Казанский государственный архитектурно-строительный университет», Казань, Россия*

Эпоксидные полимеры широко применяются в строительстве в качестве основы для конструкционных клеёв, защитно-декоративных покрытий, наливных полов и высокопрочны х волокнистых композитов. В частности, защитные покрытия для железобетонных и металлических конструкций характеризуются высокой химической стойкостью, твердостью, механической и адгезионной прочностью. Наполнение полимеров является одним из наиболее известных и важных методов их модификации. Наиболее распространѐнным способом модификации является введение ультрадисперсных и наноразмерных частиц в состав полимерных композиций [1,2]. Основной сложностью получения полимерных нанокомпозитов было и остается достижение равномерного распределения малых доз наноструктур в матрице полимера, а также не всегда контролируемое влияние нанодобавок на протекание реакции отверждения эпоксидной композиции. В данной работе рассматривались различные методы введения наночастиц (НЧ) в состав полимерного связующего и различные методы активации распределения частиц в среде жидкой олигомерной композиции. В качестве нанодобавок исследовались однослойные углеродные нанотрубки (ОУНТ) в виде 5%-ных дисперсий в дибутилфталате (компания ОКСИАЛ, г.Новосибирск), а также графеновые нанопластинки ГНП (как в нативной форме, так и в виде 5%-ных водных дисперсий компании ООО «Русграфен» г.Пермь). В качестве базовых компонентов были выбраны эпоксидная смола марки ЭД-20 и отвердитель триэтилентетраамин (ТЭТА). Отвердитель вводился в состав композиции в стехиометрическом соотношении с эпоксидной смолой. Для приготовления образцов выбрано два варианта последовательности введения углеродных наноструктур (УНС) в рецептуру связующего: 1. Эпоксидная смола ЭД-20 + модифицирующая нанодобавка + отвердитель. 2. Отвердитель + модифицирующая нанодобавка + эпоксидная смола ЭД-20. Режим отверждения композиции: выдержка в течение 24 часов при комнатной температуре и термообработка при температуре 80°С в течение 6 часов. Агрегаты ГНП достаточно устойчивы, они распределяются в матрице эпоксидного полимера в виде отдельных включений. В связи с этим, в случае применения ГНП в нативной форме и в виде водных суспензий при 2 варианте совмещения компонентов после стадии их смешения с отвердителем проводилась УЗ-обработка частотой 40 кГц в течение 5 минут.

Время гелеобразования при введении ОУНТ в отвердитель значительно меньше по сравнению с введением их в эпоксидную смолу (1 вариант совмещения). Следует отметить, что текучесть композиции после совмещения всех компонентов оказывается выше при предварительном совмещении с отвердителем. Установлены следующие экспериментальные результаты: вязкость связующего при введении дисперсии ОУНТ в ДБФ по сравнению с чистым ДБФ возрастает почти на 20%. Это связано, очевидно, с тем, что в ДБФ наблюдается процесс диспергирования агрегатов ОУНТ, а потому степень физической сетки зацеплений возрастает. Степень конверсии эпоксидных групп в присутствии ОУНТ уменьшается, поскольку доля золь-фракции увеличивается с 7 до 10%, при этом прочность на сжатие образцов остается практически на уровне показателей контрольных немодифицированных образцов. На 10-30% возрастает микротвердость отвержденных образцов.

Съемка морфологии поверхности хрупкого скола блочных эпоксидных полимеров проводилась на автоэмиссионном высокоразрешающем сканирующем электронном микроскопе Merlin компании Carl Zeiss. Методика препарирования следующая: эпоксидные

образцы помещались в жидкий азот, после чего производился скол. Из данных электронно микроскопических исследований следует, что область, которую занимают ОУНТ, представляет собой область с существенно низкой степенью химической сшивки. Несмотря на наличие большей дефектности структуры в модифицированных дибутифталатом образцах, прочность их не снижается. Углеродные трубки являются своеобразным армирующим звеном в структуре отвержденного эпоксидного полимера. Особенностью разрушения образцов при сжатии, полученных при разных вариантах совмещения компонентов, является разный характер развития деформации разрушения. При совмещении УНТ с отвердителем не наблюдается хрупкого разрушения образцов, а имеет место пластическая деформация.

В случае применения ГНП оптимальной оказалась концентрация в пересчете на эпоксидную смолу 0,1%. При этом адгезионная прочность модифицированного эпоксидного полимера возросла в 2 раза, твердость увеличилась на 15%, а истираемость снизилась на 10%. Эпоксидные полимеры, содержащие ГНП, характеризуются большими значениями модуля высокоэластичности, что следует из данных, полученных по результатам термомеханических исследований на образцах диаметром 8±0,5 мм и толщиной 3±0,1 мм в условиях сжатия при постоянной нагрузке 3 Н и постоянной скорости нагрева 3 ºС/мин. В области высокоэластического состояния наблюдается значительно меньшая величина обратимой деформации, что связано с появлением неактивных ветвящихся структур, которые в масштабе сегмента упрочняют структуру. Этим же фактом объясняется снижение массы межузловых сегментов в силу наличия сшивок типа физических зацеплений.

Из анализа основных технологических и эксплуатационных свойств эпоксидных полимеров с предлагаемыми добавками можно отметить более высокие показатели по прочности на растяжение, особенно полученных по второму методу введения их в отвердитель. Во всех случаях модификация ведет к росту температуры стеклования, что может быть полезным для получения теплостойких связующих и клеев.

Таким образом, в данной работе проведено исследование процесса модифицирования эпоксидных полимеров углеродными наноструктурами различной природы, выявлены особенности влияния способов совмещения, концентрации нанодобавок на основные показатели свойств нанокомпозитов. Полученные результаты могут быть полезны для создания новых эпоксидных материалов различного функционального назначения. Несмотря на некоторый рост себестоимости композиций (на 9-12%), эффективность их применения обусловлена потенциальным увеличением эксплуатационно-технических показателей и в целом долговечности строительных изделий и конструкций. Кроме того, использование отечественных компонентов в качестве исходного сырья позволит ускорить процесс поставок и снизить временные затраты на производство, а также повысит конкурентоспособность продукции на внутреннем рынке.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Иржак В.И. Эпоксидные композиционные материалы с углеродными нанотрубками. Успехи химии, 2011, Т. 80, № 8, С. 821-840.

2. Бадамшина Э.Р., Гафурова М.П., Эстрин Я.И. Модифицирование углеродных нанотрубок и синтез полимерных композитов с их участием. Успехи химии, 2010, Т.79, № 11,. С.1027-1063.

3. Каблов Е.Н., Кондрашов С.В., Юрков Г.Ю. Перспективы использования углеродсодержащих наночастиц в связующих для полимерных композиционных материалов. Российские нанотехнологии, 2013, Т. 8, № 3-4, С. 24-42.

Исследование сенсорных свойств модифицированных азотом углеродных нанотрубок на оксид азота

***Алимов В.Н.*[1], *Борознин С.В.*[1]**

e-mail: boroznin@volsu.ru
[1]*ФГАОУ «Волгоградский государственный университет», Волгоград, Россия*

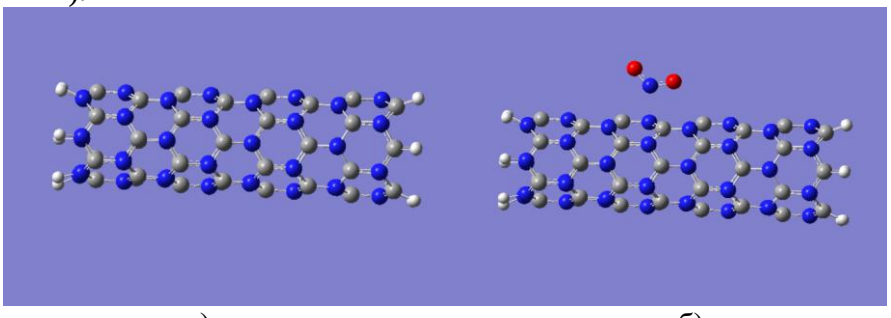
В данной работе был смоделирован процесс добавления молекулы оксида азота к полупроводниковой нехиральной (6,0) CN нанотрубки типа «зиг-заг», содержащей 50% атомов углерода и 50% атомов азота. Моделирование выполнено с помощью программ GaussView и Gaussian с использованием расчетного метода DFT, функционала B3LYP и базисного набора 6-31G. Путём компьютерного моделирования были получены параметры взаимодействия, полученные методом DFT. В результате чего был сделан вывод о том, что система углеродная нанотрубка модифицированная азотом – диоксид азота образует стабильный химический комплекс.

Наиболее широко известными являются сенсоры газов резистивного типа, в том числе, основанные на полупроводниковых газочувствительных материалах (ГЧМ). К таким сенсорам можно также отнести сенсоры, основанные на ГЧМ, модифицированных углеродными нанотрубками (УНТ). Для газовой сенсорики важным является то, что УНТ имеют аномально высокую удельную поверхность, которая определяет особенности их сорбционных и электрохимических характеристик. Кроме того, они характеризуются размерами, позволяющими создавать нанокомпозитные материалы. ГЧМ на основе УНТ способны определять довольно широкий спектр газов-поллютантов (оксиды углерода, оксиды азота, аммиак и др.) [1].

Углеродные нанотрубки представляют собой протяженные структуры, состоящие из свернутых в однослойную (ОСНТ) или многослойную (МСНТ) трубку графитовых слоев. [2].

Диаметры нанотрубок могут варьировать от 0,714 нм (наименьший известный диаметр однослойных нанотрубок) до десятков нанометров. В настоящее время длина некоторых синтезированных нанотрубок превышает 10 см. Идеальные однослойные и особенно двухслойные углеродные нанотрубки отличаются исключительными механическими и транспортными свойствами. Благодаря уникальным механическим, физическим и химическим свойствам углеродные нанотрубки находят все большее применение в новых материалах, обладающих высокой прочностью (это наполнители в полимерах, улучшающие электро- и теплопроводящие свойства, эмиттеры в электронных устройствах, в микроэлектронике, топливных элементах, сорбционных материалах, катализаторах, суперконденсаторах, сенсорах) [3].

Был смоделирован процесс взаимодействия модифицированной N-УНТ с молекулой диоксида азота (рис. 1).



а) б)

Рис. 1 а) модель модифицированной N-УНТ; б) модель взаимодействия модифицированной N-УНТ с молекулой диоксида азота.

В результате была построена зависимость энергии взаимодействия диоксида азота с N-УНТ. На рис 2 отчетливо виден один минимум.



Рис. 2. Зависимость энергии сорбционного и сенсорного взаимодействия N-УНТ с диоксидом азота.

На основании проведенного компьютерного моделирования было установлено наличие сорбционного и сенсорного взаимодействия между наносистемой N-УНТ и диоксидом азота.

Следовательно, углеродным нанотрубкам можно найти применение в различных отраслях производства, науки и техники. Что буквально уменьшит стоимость производства и увеличит запас прочности соответствующей детали, из-за своих уникальных свойств, благодаря уникальным механическим, физическим и химическим свойствам углеродные нанотрубки находят все большее применение в новых материалах, обладающих высокой прочностью (это наполнители в полимерах, улучшающие электро- и теплопроводящие свойства, эмиттеры в электронных устройствах, в микроэлектронике, топливных элементах, сорбционных материалах, катализаторах, суперконденсаторах, сенсорах)

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Виктор Н., Королев Д. В., Галагудза М. М., Постнов Д. В. Наносенсоры в биологии и медицине: принципы работы и перспективы применения. Биотехносфера, 2013, № 2 (26).

2. Лозовик Ю. Е., Попов А. М. Образование и рост углеродных наноструктур — фуллеренов, наночастиц, нанотрубок и конусов. УФН, 1997, т. 167, с. 751–774.

3. Надда М. З., Петров В. В., Шихабудинов А. М. Исследование свойств нанокомпозитного материала для высокочувствительных сенсоров диоксида азота. ИВД, 2012, № 4–2.

Низкоомные газовые сенсоры на основе тонких плёнок ITO для работы в жёстких условиях эксплуатации

Алмаев А.В.[1], Чикиряка А.В.[2], Яковлев Н.Н.[1]

e-mail: almaev.alex@mail.tsu.ru

[1]ФГАОУ ВО «Национальный исследовательский Томский государственный университет», Томск, Россия

[2]ФГБУН «Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе Российской академии наук», Санкт-Петербург, Россия

Широкозонные оксидные материалы широко применяются для разработки высокотемпературных газовых сенсоров. Однако многие из них характеризуются высоким базовым сопротивлением, повышенным уровнем шумов и нестабильностью параметров при работе в агрессивных средах. Использование низкоомных чувствительных слоёв позволяет упростить схемотехнику, повысить помехоустойчивость и улучшить воспроизводимость характеристик сенсоров [1]. Перспективным материалом для создания таких сенсоров является ITO [2], обладающий высокой электропроводностью, термической стабильностью и технологической совместимостью с методами микроэлектронного производства.

Целью работы является разработка сенсорных чипов на основе тонких плёнок ITO, исследование их структурных и газочувствительных свойств при повышенных температурах и в условиях воздействия реальных газовых смесей.

Тонкие плёнки ITO были получены методом магнетронного распыления оксидной мишени в кислородно-аргоновой плазме. В качестве подложки использовалась керамическая пластина AlN. Толщина нанесенных плёнок ITO составляла 180 нм. После напыления плёнки были подвергнуты отжигу в течение 60 минут в атмосфере воздуха при T_{ann} = 500 °C и 600 °C. Обозначим серию образцов тонких пленок ITO, подвергнутых отжигу при T_{ann} = 500 °C – ITO-500, а при T_{ann} = 600 °C – ITO-600. На поверхности плёнок формировались Pt плоскопараллельные контакты при межэлектродном расстоянии 150 мкм.

Для исследования структурных свойств тонких плёнок ITO привлекались рентгеновский дифракционный анализ (РДА), атомно-силовая микроскопия (АСМ), энергодисперсионная рентгеновская спектроскопия (ЭДС) и оптическая спектроскопия. Для исследования электропроводящих и газочувствительных свойств тонких плёнок ITO проводили измерения временных зависимостей сопротивления R образцов при воздействии газов H_2, NH_3, CO, NO_2 и CH_4.

РДА показал, что фазовый состав тонких плёнок ITO, подвергнутых отжигу, соответствует c-In_2O_3 фазе. Выявить наличие фазы SnO_2 в плёнках не удалось. Микрорельеф поверхности плёнок ITO-500 представлен мелкими зёрнами с размерами d_{gr} = 40–100 нм, которые объединяются в более крупные агломераты с размерами до 350 нм (рис. 1 (а)). Повышение T_{ann} до 600 °C приводит к увеличению размеров мелких зёрен до 80–140 нм (рис. 1 (б)). При этом размеры агломератов изменяются незначительно. Анализ ЭДС спектров показал, что отношение концентраций [In]/[Sn] составляет 13,5 и 11,7 в плёнках ITO-500 и ITO-600, соответственно. Плёнки независимо от T_{ann} характеризуются высоким коэффициентом пропускания в видимом диапазоне спектра, превышающим 80 %. Оцененные значения ширины запрещенной зоны составили 3,62 и 3,65 эВ для образцов ITO-500 и ITO-600, соответственно.

С повышением температуры нагрева образцов T с 50 до 150 °C сопротивление плёнок в чистом воздухе R_{air} (базовое сопротивление), независимо от условий отжига, слабо снижается (рис. 2). С дальнейшим повышением T до 350–400 °C R_{air} возрастает. Причинами этому служат активная хемосорбция кислорода на поверхности тонких плёнок и переход хемосорбированного кислорода из молекулярной формы O_2^- в атомарную O^-, которая является наиболее активной при взаимодействии с восстановительными газами [3]. Рост сопротивления с повышением T характерен для тонких плёнок, когда поверхность определяет электропроводящие свойства в большей мере, чем объем. При T > 350–400 °C R_{air} снова падает

с повышением T из-за проявления десорбции O^-. Наблюдаемое увеличение R_{air} коррелирует с результатами холловских измерений для поликристаллических тонких плёнок ITO. Подвижность электронов незначительно снижается с T из-за рассеяния на ионах примеси и границах зёрен.

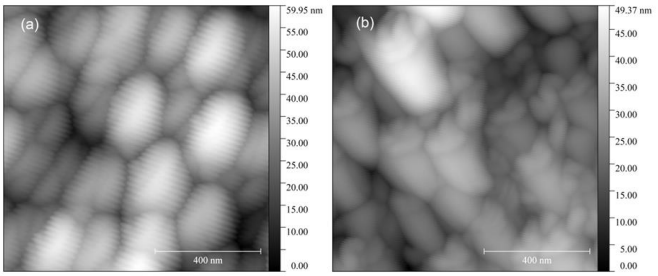


Рис. 1. АСМ-снимки поверхности тонких плёнок ITO, подвергнутых отжигу при T_{ann} = 500 (а) и 600 °C (б).

Повышение T отжига тонких плёнок ITO приводит к снижению R_{air}, полагается, главным образом за счёт наблюдаемого увеличения размера зёрен. Значения сопротивлений тонких плёнок ITO при разных температурах не превышают 350 Ом. Таким образом, сенсоры на основе исследуемых пленок, обладают низким базовым сопротивлением.

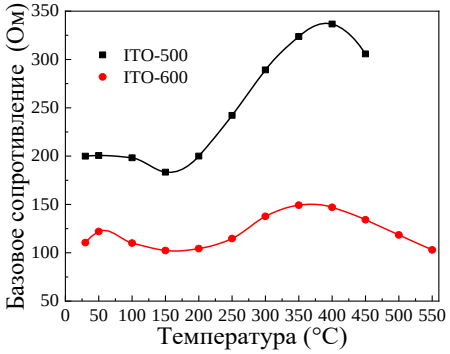


Рис. 2. Температурные зависимости сопротивлений плёнок ITO, подвергнутых отжигу при T_{ann} = 500 и 600 °C, в чистом воздухе.

На рис. 3 показаны температурные зависимости откликов тонких плёнок ITO, подвергнутых отжигу при T_{ann} = 500 и 600 °C, на фиксированные концентрации различных газов. Воздействие восстановительными газами в интервалах T = 150–450 °C и 150–550 °C для тонких плёнок ITO-500 и ITO-600, соответственно, приводит к обратимому уменьшению их сопротивлений. В области более низких температур нагрева, $T \leq 100$ °C, сопротивление образцов после воздействия газами практически не восстанавливается. Воздействие окислительного газа NO_2 на образцы приводит к обратимому увеличению их сопротивления. Кривые на рис. 3 характеризуются наличием чётких максимумов. Повышение T_{ann} тонких плёнок ITO приводит к снижению их сопротивлений и откликов на все газы, кроме NH_3. Независимо от T_{ann}, тонкие плёнки ITO демонстрируют относительно низкие отклики на CH_4 и CO_2.

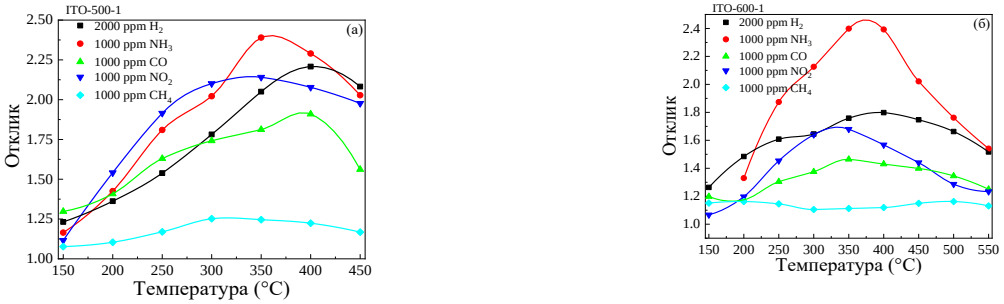


Рис. 3. Температурные зависимости откликов тонких плёнок ITO, подвергнутых отжигу при T_{ann} = 500 (а) и 600 °C (б), на фиксированные концентрации различных газов.

Оценки показали, что дебаевская длина экранирования L_D для тонких плёнок ITO-500 с повышением T с 30 до 450 °C возрастает с 0,57 до 1,1 нм. Выполняется соотношение $L_D << d_{gr}$ во всем интервале T и для тонких плёнок ITO имеет место надбарьерный механизм проводимости. Соответственно, механизм сенсорного эффекта аналогичен предложенному нами для плёнок In_2O_3 [4]. В работе [5] исследован сенсорный механизм системы двух оксидов In_2O_3 и SnO_2, синтезированных методом импрегнирования. Содержание оксида олова в смеси изменялось в широких пределах. Было установлено, что при увеличении содержания SnO_2 с 0 до 10 масс. % проводимость смеси возрастает, а отклик на H_2 падает. Такой состав соответствует ITO и исследуемым образцам. Предел растворимости SnO_2 в оксиде индия составляет 10–15 масс. %. До этих значений концентрации диоксида олова, электропроводность системы определяется In_2O_3. Авторы показали, что внедрение олова в матрицу оксида индия приводит к снижению поверхностной плотности хемосорбированных ионов кислорода, которые в свою очередь являются центрами адсорбции для H_2, что подтверждается нашими данными при снижении откликов плёнок, подвергнутых отжигу при 600 ºC. При дальнейшем увеличении концентрации SnO_2 проводимость падает, а отклик на H_2 возрастает. Для исследуемых плёнок, Sn (SnO_2) выступает в качестве добавки к In_2O_3, снижающей сопротивление последнего. Сенсорные свойства исследуемых плёнок определяются In_2O_3.

В заключение можно отметить, что для тонких плёнок ITO, нанесенных методом магнетронного распыления на керамические подложки AlN, проведены исследования структурных и газочувствительных свойств. Установлено, что газовая чувствительность плёнок ITO определяется преимущественно In_2O_3. SnO_2 выступает только в качестве добавки, источника донорной примеси Sn. Показана возможность разработки сенсоров с низким базовым сопротивлением и относительно высокой чувствительностью к газам.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Koo W.-T., Cho H.-J., Kim D.-H., Kim Y.H., Shin H., Penner R.M., Kim I.-D. Chemiresistive Hydrogen Sensors: Fundamentals, Recent Advances, and Challenges. ACS Nano, 2020, vol. 14, № 11, pp. 14284-14322.

2. Mokrushin A.S., Fisenko N.A., Gorobtsov P.Y., Simonenko T.L., Glumov O.V., Melnikova N.A., Simonenko N.P., Bukunov K.A., Simonenko E.P., Sevastyanov V.G., Kuznetsov N.T. Pen plotter printing of ITO thin film as a highly CO sensitive component of a resistive gas sensor. Talanta, 2021, vol. 221, P. 121455.

3. Sahm T., Gurlo A., Bârsan N., Weimar U., Mädler L. Fundamental studies on SnO_2 by means of simultaneous work function change and conduction measurements. Thin Solid Films, 2005, vol. 490, № 1, pp. 43-47.

4. Алмаев Д.А., Алмаев А.В., Николаев В.И., Бутенко П.Н., Щеглов М.П., Чикиряка А.В., Печников А.И. Высокая чувствительность пленок оксида индия, полученных методом хлоридной газофазной эпитаксии, к аммиаку. ФТП, том 57, № 3, с. 145-152.

5. Gerasimov G.N., Gromov V.F., Ikim M.I., Ilegbusi O.J., Ozerin S.A., Trakhtenberg L.I. Structure and gas-sensing properties of SnO_2-In_2O_3 nanocomposites synthesized by impregnation method. Sens. Actuat. B-Chem., 2020, vol.320, P. 128406.

Углеродосодержащие бислойные системы: первопринципное моделирование в атомноподобном базисе

Аникина Е.В.[1], ***Каплун М.В.***[1], ***Бескачко В.П.***[1]

e-mail: anikinaev@susu.ru

[1]*ФГАОУ ВО «Южно-Уральский государственный университет (национальный исследовательский университет)», Челябинск, Россия*

Ван-дер-ваальсовые системы с углеродосодержащими монослоями – потенциальные структуры для создания новых элементов электроники [1]. Многообразие этих систем и методов их модификации делает компьютерное моделирование незаменимым инструментом первичного отбора. Оно позволяет быстро перебрать большое количество кандидатов и отправить на синтез только те, что потенциально обладают оптимальными характеристиками. К сожалению, использование разложения волновой функции системы в базисе плоских волн, применяемого в методе функционала электронной плотности, приводит к ощутимым затратам вычислительных ресурсов, поэтому для моделирования подобных материалов более эффективным подходом является базис локализованных атомноподобных орбиталей. Однако использование такого базиса вносит погрешность, известную как ошибка суперпозиции базисного набора. Данная работа направлена на изучение того, как параметры атомноподобного базиса влияют на величину этой ошибки при расчетах слабосвязанных углеродосодержащих бислойных систем.

Исследование двухслойного графена и бислоя графен/монослой C_2N проводилось в пакете SIESTA [2]. Тщательный подбор параметров моделирования (разбиение прямого и обратного пространства) позволил получить точность расчета энергии связи порядка 0.25 мэВ (на атом графена). В работе использовались базисы двух размеров SZP (2 базисные функции на валентную орбиталь) и DZP (3 базисные функции на валентную орбиталь). Следуя методологии, описанной в [3], для каждого сочетания «материал-базис» выполнялась дополнительная оптимизация параметров атомноподобных орбиталей.

Проведенное моделирование показало, что использование малого базиса SZP хотя и ускоряет вычисления, не дает результатов, систематически согласующихся с расчетами с использованием базиса плоских волн. Без учета поправки к ошибке суперпозиции базисного набора величина энергии связи может кратно превышать корректное значение, а межслоевое расстояние может быть заниженным на ~15%. Таким образом, корректное описание слабосвязанных систем в базисе атомноподобных орбиталей требует обязательной оптимизации самого базиса и учета поправок на ошибку суперпозиции базисного набора как в геометрических характеристиках системы, так и в энергии связи.

Финансирование: работа выполнена в рамках грантовой программы Виктора Христенко «Шаг в будущее».

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Radsar T., Khalesi H., Ghods V. Graphene properties and applications in nanoelectronics. Opt. Quantum Electron., 2021, vol. 53, art. no. 178, pp. 30-32.

2. Soler J. M. et al. The SIESTA method for ab initio order-N materials simulation. J. Phys.: Condens. Matter, 2002, vol. 14, iss. 11, pp. 2745–2779.

3. Anikina E. V., Beskachko V. P. Basis set superposition error: Effects of atomic basis set optimization on value of counterpoise correction. Bull. South Ural State Univ. Ser. “Mathematics. Mech. Physics”, 2020, vol. 12, iss. 1, pp. 55–62.

Исследование кинетики адсорбции органических красителей на активированном биоугле из растительных отходов переработки рапса

Бадин Д.А.[1], Буракова И.В.[1], Бураков А.Е.[1], Баранов Д.А.[1]

e-mail: badin.dima97@gmail.com
ФГБОУ ВО «Тамбовский государственный технический университет», Тамбов, Россия

Биоуголь благодаря своей развитой пористой структуре и разнообразию поверхностных функциональных групп демонстрирует высокую эффективность в качестве сорбционного материала, находя применение в извлечении загрязнителей из водных сред, улавливании летучих соединений из воздуха, а также в процессах селективного хранения газов. В условиях нарастания экологической загрязненности в мире и исчерпаемости традиционного сырья приоритетное значение приобретает получение активированных сорбционных материалов на основе возобновляемых ресурсов [1]. Углеродные сорбенты, синтезируемые из биомассы, в частности из отходов сельскохозяйственного производства, выступают устойчивой альтернативой традиционным сорбентам на основе ископаемого угля и нефтепродуктов. Использование такого подхода позволяет снизить зависимость от невозобновляемых источников сырья и обеспечить эффективную утилизацию побочных продуктов агропромышленного комплекса с получением востребованных сорбционных материалов [2].

Авторы статьи разработали высокоэффективный сорбент – биоуголь из растительного сырья для процессов водоподготовки и очистки стоков промышленных предприятий. В качестве основного источника углерода использовали сельскохозяйственные отходы рапса, которые предварительно измельчали. Биоуголь получали методом гидротермальной карбонизации (ГТК) в автоклаве при 180 °С в течение 12 часов. После чего биомассу промывали дистиллированной водой и фильтровали для удаления побочных продуктов реакции и сушили при 100 °С до постоянной массы. Далее материал подвергали ступенчатой карбонизации в инертной среде при температурах до 750 °С. В работе также оценивали влияние щелочной активации на физико-химические свойства получаемого биоугля. Готовый карбонизат подвергали щелочной активации, для этого его смешивали с гидроксидом калия (KOH) в массовом соотношении 1:6. Активацию проводили при соотношении «карбонизат : KOH» в инертной среде при 400 °С, а затем при 750 °С в течение часа при каждой температуре. Итоговый продукт представлял собой мелкодисперсный порошок черного цвета.

В таблице 1 приведены параметры пористости синтезируемого в работе материала.

Таблица 1. Параметры пористости* биоугля из отходов рапса.

№	*Наименование образца*	$S_{БЭТ}$, $м^2/г$	S_{DFT}, $м^2/г$	*d, нм*	$V_{общий}$, $см^3/г$
1	Активированный биоуголь	3193	2539	2,44	1,664

* $S_{БЭТ}$ – удельная поверхность по методу Брунауэра-Эммета-Теллера (БЭТ), $м^2/г$; $V_{общий}$ – общий объем пор, $см^3/г$; S_{DFT} – удельная поверхность, рассчитанная по теории функционала плотности, $м^2/г$; d – средний диаметр пор, нм.

Активация биоугля из рапса приводит к образованию мезопор и существенному увеличению удельной поверхности (табл. 1). Таким образом, активированный биоугли из рапса показывают максимальную величину удельной поверхности по БЭТ 3193 $м^2/г$ при общем объеме пор 1,664 $см^3/г$.

В работе проводилась оценка сорбционной способности активированного угля на основе рапса. В условиях ограниченного объема в статическом режиме были проведены кинетические адсорбционные исследования по определению сорбционной емкости биоуглей и времени.

Сорбционные исследования проводили на модельных растворах органических красителей малахитового зеленого (МЗ) и метанилового желтого (МЖ). Условия эксперимента: вес сорбента – 0,01 г, объем раствора – 30 мл, концентрация раствора – 1500 мг/л, время сорбции – 2; 5; 10; 15; 30; 45; 60 мин. Растворы перемешивались при 100 об/мин и комнатной температуре на ротаторе Multi Bio RS-24 (Biosan) и затем фильтровали. Оптическую плотность растворов синтетических красителей определяли на спектрофотометре ПЭ-5400В при длинах волн λ(МЗ)=713 нм и λ(МЖ)=530 нм. На рисунке 1 приведены результаты исследований.

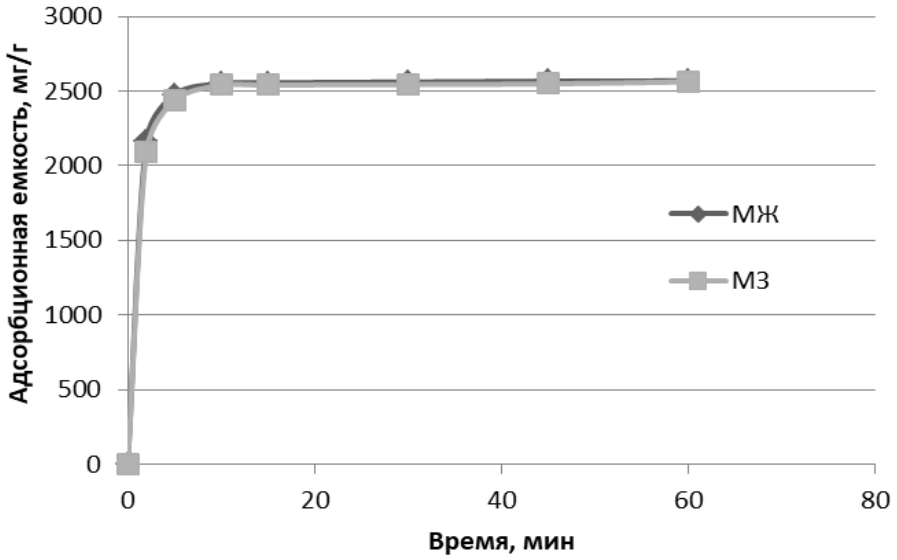


Рис. 1. Кинетика сорбции метанилового желтого и малахитового зеленого красителей на активированном биоугле из отходов рапса

В указанных условиях проведения адсорбционных исследований установлено, что высокие показатели адсорбции активированный материал проявляет уже при двух минутах проведения эксперимента. Сорбционное равновесие наступает на 10 мин. Максимальная емкость сорбента по малахитовому зеленому составила 2569,02 мг/г, а по метаниловому желтому – 2562,25 мг/г соответственно. Таким образом, предварительные сорбционные исследования доказали потенциальную перспективность активированного биоугля из рапса для процессов жидкофазной адсорбции.

Работа была выполнена на базе Центра коллективного пользования «Получение и применение многофункциональных наноматериалов» (Тамбовский государственный технический университет).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Timirgaliev A. N., Burakova I. V., Rybakova S. O., Ananyeva O. A., Yarkin V. O., Kuznetsova T. S., Kadum A. H. K., Burakov A. E. Removal of organic dyes from aqueous solutions using a graphene-containing sorbent based on activated rapeseed biochar: Kinetics and isotherms. Journal of Advanced Materials and Technologies, 2024, vol. 9, № 3, pp. 177–187.

2. Ramirez L. A., Alvarez M., Gutierrez V. S. From agro-alimentary residue to catalyst: Transforming sunflower seed husk waste into modified biochar for efficient ibuprofen degradation in water. Journal of Water Process Engineering, 2025, vol. 72, p. 107458.

Углеродные нанотрубки на метеоритном металле: синтез и сравнительный анализ с внеземными наноструктурами

Бахмутова А.С.[1], ***Гроховский В.И.***[1], ***Яковлев Г.А.***[1, 2], ***Панкрушина Е.А.***[1, 2]

e-mail: n.s.begun@gmail.com

[1]*ФГАОУ ВО «УрФУ имени первого Президента России Б.Н. Ельцина», Екатеринбург, Россия*

[2]*Институт геологии и геохимии им. академика А.Н. Заварицкого Уральского отделения РАН, Екатеринбург, Россия*

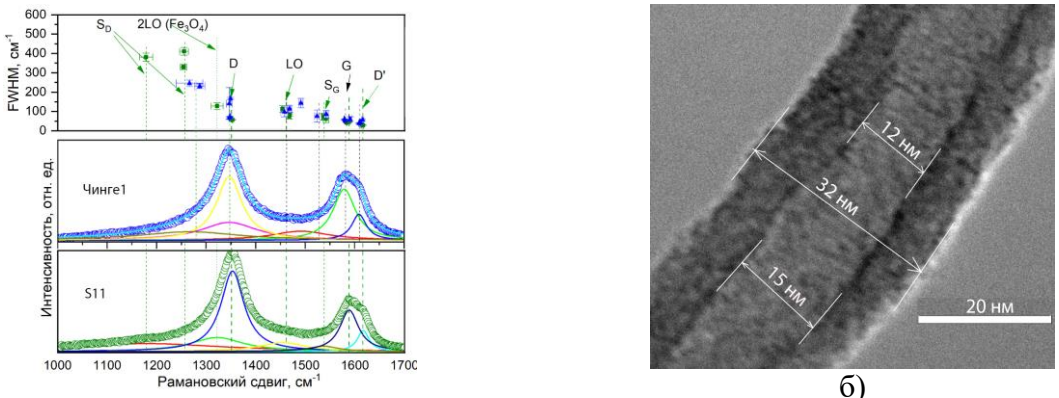
Обнаружение углеродных наноструктур в объектах внеземного происхождения расширяет представление об эволюции вещества в Солнечной системе. Первые доказательства существования углеродных нанотрубок (УНТ) в космосе были получены при анализе образцов разных метеоритов, например, Allende [1]. Помимо многослойных УНТ (МУНТ), о которых было известно ранее, новые исследования лунного грунта [2] показали наличие в космосе и однослойных УНТ. Описанные факты указывают на возможность протекания каталитических реакций синтеза УНТ в условиях открытого космоса. Наличие в составе метеоритов металлических частиц различного размера и состава позволяет рассматривать внеземное вещество как естественную каталитическую матрицу для роста наноматериалов. В настоящей работе представлены результаты экспериментов по синтезу УНТ на железоникелевых поверхностях метеоритов Чинге и Сеймчан. Несмотря на то, что условия эксперимента отличались от условий глубокого космоса, основной задачей являлось изучение каталитического потенциала природного внеземного вещества.

В качестве каталитических подложек использованы фрагменты двух метеоритов с различной структурой железоникелевого сплава: Сеймчан (образец S11) с размером фаз <0,1 мкм и Чинге (образец Чинге 1) с размером фаз 0,1–1 мкм. Подготовка поверхности включала изготовление стандартных шлифов с последующим травлением в 2% растворе HNO_3 в этаноле (5 мин) для развития микрорельефа. Исходная микроструктура метеоритных фаз исследована на оптическом микроскопе ZEISS Axiovert 40 MAT, а также методами растровой электронной микроскопии (РЭМ) и энергодисперсионной рентгеновской спектроскопии (ЭДС) на микроскопе ZEISS Sigma VP. Перед синтезом образцы подвергали предварительному высокотемпературному окислению (600°C, 10 мин) в среде воздуха и паров воды при давлении 10 кПа. Синтез МУНТ проводился методом химического осаждения из газовой фазы (CVD) на установке CVDomna. Рост структур осуществлялся при пиролизе смеси этанола и воздуха (550 °C, 15 кПа) в течение 10 минут с последующим охлаждением в разреженной атмосфере. Морфологию полученных МУНТ исследовали с помощью РЭМ и просвечивающего электронного микроскопа (ПЭМ) JEM-2100. Рамановские спектры образцов исследовали на LabRam HR Evolution при длине волны 514 пространственным разрешением 1–2 мкм. Обработку спектров и их аппроксимацию функцией Лоренца выполняли в программном пакете OriginPro 2021.

При исследовании метеоритных подложек до синтеза выявили гетерогенную структуру, состоящую из включений γ-фазы (Fe-Ni, Ni > 30 вес.%) в матрице α-фазы (Ni ~ 7 вес.%). В процессе пробоподготовки менее стойкая α-фаза была частично удалена при травлении, что привело к селективному обогащению приповерхностного слоя никелем [3]. В результате синтеза на поверхности метеоритов получены МУНТ со средним внешним диаметром 20 нм и внутренним каналом 5–15 нм; количество слоев составило 30–40 (рис. 1 (б), межслойное расстояние составило порядка 0,36 нм. В рамановских спетрах образцов (рис. 1 (а) зафиксированы характерные для МУНТ полосы, положение которых коррелирует с данными, полученными для аналогичных структур в работе [4].

Установлено, что морфология и дефектность МУНТ напрямую зависят от дисперсности каталитических фаз метеорита. Образцы, выращенные на мелкодисперсной подложке S11

(размер фаз <0,1 мкм), характеризуются более высокой однородностью и меньшей степенью дефектности по сравнению со структурами, полученными на подложке Чинге (размер фаз 0,1-1 мкм). Сравнительный анализ синтезированных МУНТ с внеземными углеродными наноструктурами [1, 2] выявил близость их базовых структурных параметров. В частности, межслоевое расстояние в природных МУНТ составляет порядка 0,37 нм, что сопоставимо с результатами данной работы (в среднем 0,36 нм). При этом характерные полосы в рамановских спектрах углеродных наноструктур из лунного реголита отличаются значительно большей полушириной (FWHM) и наличием выраженных боковых компонент [2]. Это указывает на более высокую концентрацию дефектов и низкую степень упорядоченности природных образцов в сравнении с лабораторными аналогами.



а) б)

Рис. 2. Рамановские спектры синтезированных МУНТ (а); МУНТ, синтезированные на поверхности Чинге1 (б). Изображение получено в ПЭМ

Экспериментально подтвержден каталитический потенциал метеоритного железа, позволяющий получать МУНТ, структурно близкие к природным внеземным аналогам, но обладающие при этом более высокой степенью упорядоченности.

Финансирование: работа выполнена в рамках государственного задания Министерства науки и высшего образования РФ FEUZ-2026-0009.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Cruz-Rosas H., Riquelme F., Sanriago P. Multiwall and bamboo-like carbon nanotubes from the Allende chondrite: A probable source of asymmetry. PLoS ONE. 2019, vol. 14. p. e0218750.

2. Zhang W., Wang Z., Liu F. Discovery of Naturally Occurring Single-Walled Carbon Nanotubes and Graphitic Carbon on the Far Side of the Moon. 2026, vol. 26, № 2, pp. 917-925.

3. Begunova A.S, Yakovlev G.A., Kamalov R.V., Pankrushina E.A., Grokhovsky V. Raman spectroscopy of nanomaterials synthesized on the iron meteorites surfaces. Journal of Raman Spectroscopy. 2022, vol. 53, pp. 472–484.

4. Antunes E.F., Lobo A.O., Corat E.J., Trava-Airoldi V.J., Martin A.A., Verı´ssimo C. Comparative study of first-and second-order Raman spectra of MWCNT at visible and infrared laser excitation. Carbon. 2006, vol. 44, pp. 2202-2211.

Потенциал использования терморасширенного графита в качестве углеродного сорбента

***Берестнева Ю.В.*[1], Ракша Е.В.[2], Ересько А.Б.[2], Филимонов Д.А.[1]**

e-mail: berestnevayuv@mail.ru

[1]*ФГБУ «Институт неотложной и восстановительной хирургии им В.К. Гусака» Минздрава России, Донецк, Россия*

[2]*Объединенный институт ядерных исследований, Дубна, Россия*

Углеродные материалы, в том числе терморасширенный графит (ТРГ), нашли широкое применение в научных исследованиях, а также имеют прикладное значение в различных отраслях. ТРГ относится к гидрофобным кристаллическим материалам и обладает уникальной нанопористой структурой, что обуславливает его физико-химическии свойства. Он является многообещающим сорбционным материалом для очистки воды и извлечению экотоксикантов – тяжёлых металлов, органических соединений, нефти и нефтепродуктов [1-4]. ТРГ получают путем термической, электрохимической и микроволновой обработки соединений интеркалирования графита. В докладе обсуждаются особенности синтеза, структуры, морфологии поверхности и физико-химические свойства ТРГ на основе соединений интеркалирования графита акцепторного типа [5].

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Берестнева Ю.В., Межевова А.С. Изучение возможности применения углеродного сорбента на основе соединения соинтеркалирования нитрата графита для очистки воды от ионов тяжелых металлов. Экология и промышленность России, 2024, Т. 28, № 7, С. 26-31.

2. Берестнева Ю.В., Войташ А.А., Ракша Е.В., Балкушкин Р.Н., Межевова А.С., Савоськин М.В. Оценка возможности применения терморасширенного графита для очистки загрязненных природных вод. Химическая безопасность, 2021, Т.5, № 1, С. 110-124.

3. Войташ А.А., Берестнева Ю.В., Ракша Е.В., Давыдова А.А., Савоськин М.В. Исследование сорбции ароматических соединений из водных растворов терморасширенным графитом. Химическая безопасность, 2020, Т.4, № 1, С. 144-156.

4. Войташ А.А., Берестнева Ю.В., Ракша Е.В., Савоськин М.В. Очистка воды от нефтепродуктов сорбентом на основе терморасширенного графита для орошения сельскохозяйственных угодий. Научно-агрономический журнал, 2020, Т. 110, № 3, С. 4-8.

5. Berestneva Yu.V., Raksha E.V., Voitash A.A., Arzumanyan G.M., Savoskin M.V. Thermally expanded graphite from graphite nitrate cointercalated with ethylformate and acetic acid: effect of the conditions of the intercalated compound obtaining. Journal of Physics: Conference Series, 2020, vol. 1658, P. 012004.

Текстурные траектории изменения анизотропии Ni-нанопленок

Берестова С.А.[1], Серков К.В.[1]

e-mail: s.a.berestova@urfu.ru
[1]ФГАОУ ВО «Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина», Екатеринбург, Россия

Эффективные свойства Ni-нанопленок зависят от многих факторов, один из которых является геометрическим. Благодаря варьированию геометрических параметров, и, следовательно, изменению в некоторых пределах эффективных физико-механических свойств становиться возможным прогнозировать их, настраивая под нужды инженеров при создании, например, МЭМС, высокочастотных резонаторов.

В работе исследуется взаимосвязь между эволюцией кристаллографической текстуры и макроскопической упругой анизотропией в тонких пленках никеля. На основе микромеханического моделирования построены «текстурные траектории», описывающие изменение эффективных констант упругости в процессе роста и термического воздействия.

Анизотропия физическо-механических свойств нанопленок Ni определяется не только типом кристаллической решетки, но и спецификой формирования предпочтительных ориентаций (кристаллографической текстуры). Для ГЦК-металлов, к которым относится никель, управление упругим откликом через текстурный дизайн является критически важным при создании МЭМС и высокочастотных резонаторов.

Для расчета эффективных констант упругости использовался формальный метод расчета в шестимерном векторном пространстве собственных упругих состояний. Усреднения входят в границы по Фойгту-Ройссу. Текстурное состояние описывалось с помощью обратных полюсных фигур. Аналитические расчеты проводились также и для различных типов текстур.

Под текстурной траекторией понимается непрерывное изменение вектора упругих свойств в пространстве коэффициентов анизотропии при варьировании параметров текстуры. Установлено, что для пленок Ni переход от хаотического распределения зерен к выраженным компонентам приводит к росту модуля Юнга в плоскости пленки. Построены векториальные поверхности модуля Юнга и сдвига. Выявлено, что при увеличении концентрации текстурной компоненты <100> наблюдается экстремальное снижение коэффициента Пуассона, что может быть использовано для компенсации температурных напряжений. Показано, что с увеличением толщины пленки текстурная траектория смещается от метастабильных состояний к равновесной ориентации, что сопровождается нелинейным изменением параметров анизотропии. Предложен анимированный процесс изменения векториальных поверхностей модуля Юнга и модуля сдвига вдоль разработанных модельных траекторий непрерывного изменения текстурных параметров.

Разработанный подход позволяет прогнозировать упругое поведение нанопленок Ni на основе данных рентгеноструктурного анализа. Полученные траектории служат инструментом для прецизионной настройки механических характеристик наноструктур путем варьирования параметров текстуры.

Функциональные свойства наноструктурированных пленок PbS, содопированных лантаном и йодом

Боков Т.С.[1], ***Зарубин И.В.***[1]

e-mail: timofeybokov@mail.ru

[1]*ФГАОУ ВО «Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина», Екатеринбург, Россия*

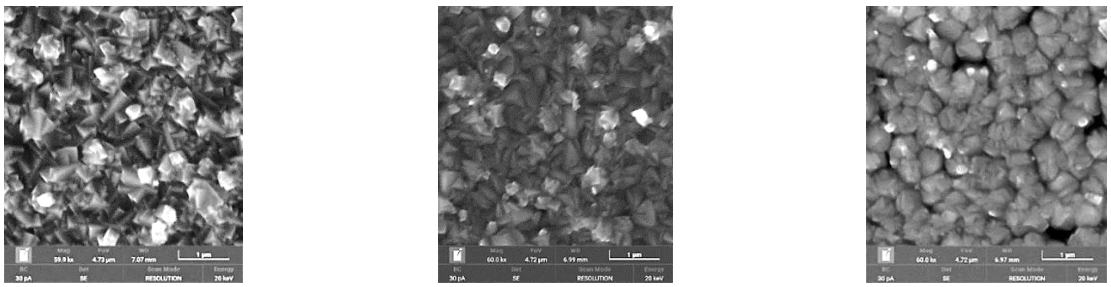
Наиболее перспективным и универсальным полупроводниковым материалом является сульфид свинца – представитель класса соединений A^{IV}–B^{VI}. В полупроводниках группы халькогенидов свинца, в частности в кристаллах галенита PbS, выявлен эффект термодинамической нестабильности кристаллической решётки [1], обусловленный смещением атомов свинца из центросимметричных положений. Электронная структура PbS характеризуется наличием большого числа энергетических уровней собственных дефектов как в запрещённой зоне, так и в разрешённых зонах, что создаёт предпосылки для реализации сложных физических процессов при введении различных легирующих примесей [2].

Введение редкоземельных элементов в решётку PbS, в том числе путём замещения ионов свинца, вызывает модификацию зонной структуры и образование глубоких уровней в запрещённой зоне, что, в свою очередь, приводит к изменению функциональных характеристик материала. Анализ научных публикаций последних лет показывает, что плёнки PbS, легированные лантаном, представляют особый интерес для исследований. В частности, добавление La способствует более эффективному разделению электронно-дырочных пар, усиливая влияние на функциональные свойства, что открывает возможности их применения в фотонике, фотовольтаике, фотопроводимости, а также в устройствах быстрого оптического переключения и обработки информации [3]. Легирование поликристаллических плёнок PbS анионной примесью (йод I^-) обеспечивает им высокую вольтовую чувствительность к инфракрасному излучению за счёт инверсии типа проводимости ($n \rightarrow p$), сопровождающейся аномально малыми значениями постоянной времени [4].

В настоящей работе тонкоплёночные слои PbS синтезировали методом химического осаждения из водных растворов, включающих ацетат свинца $Pb(CH_3COO)_2$, цитрат натрия $Na_3C_6H_5O_7$, гидроксид аммония NH_4OH и тиомочевину N_2H_4CS. Легирование плёнок PbS осуществляли ионами редкоземельного элемента лантана (La^{3+}) и йода (I^-) посредством дополнительного введения в реакционную среду 1 мМ раствора хлорида лантана $LaCl_3$ и 0.10–0.20 М раствора йодида аммония NH_4I.

Фотоэлектрические характеристики (темновое сопротивление R_T, вольтовая чувствительность U_s) элементов размером 5×5 мм на основе пленок PbS измеряли на установке К54.410 с источником излучения АЧТ 673К при частоте модуляции излучения 1000 Гц, напряжении смещения 20 В.

Морфологические особенности и элементный состав плёнок исследовали с использованием сканирующего электронного микроскопа Tescan Vega 4 LMS, оснащённого системой энергодисперсионной рентгеновской спектроскопии (EDS) Oxford Xplore EDS – AZtecOne. Микроизображения пленок содопированных лантаном и йодом PbS(La, I), осажденных из реакционных ванн, содержащих 1 mM $LaCl_3$ при варьировании концентрации NH_4I, М: 0.10 (а), 0.17 (б), 0.20 (в), приведенные на рис. 1, свидетельствуют о существенном влиянии на морфологию пленок. Наблюдается изменение не только формы и ориентации кристаллитов, но, как видно из рис. 2 а, зависимость количества частиц нанодиапазона, установленных с помощью программного обеспечения Measurer и пакета прикладных программ Grapher и Origin, от концентрации йодида аммония в реакционной смеси имеет экстремальный характер.



а б в

Рис. 1. Электронно-микроскопические изображения пленок PbS(La, I), осажденных из реакционных ванн, содержащих 1 mM $LaCl_3$ при варьировании концентрации NH_4I, M: 0.10 (а), 0.17 (б), 0.20 (в)



а б

Рис. 2. Содержание наночастиц (а) и фотоэлектрические свойства пленок PbS(La, I), осажденных из реакционных ванн, содержащих 1 mM $LaCl_3$ при варьировании концентрации NH_4I от 0.10 до 0.20 М (б)

Аналогичный характер демонстрируют зависимости вольтовой чувствительности U_s (рис. 2б) и темнового сопротивления R_T (рис. 2б, вставка) пленок сульфида свинца от концентрации йодида аммония в реакционной смеси. Примечательно, что максимальное значение вольтовой чувствительности, составляющее 5600 мкВ, установлено у пленки PbS(La, I), содержащей максимум наночастиц в своей структуре – до 17%. Вероятно, формирование оптимального количества наночастиц приводит к увеличению площади межзёренных границ и гетерогенных областей, что способствует более эффективному разделению и переносу носителей заряда. Это, в свою очередь, повышает фоточувствительные свойства полупроводникового соединения.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Bozin E. S., Malliakas C. D., Souvatzis P. et al. Entropically stabilized local dipole formation in lead chalcogenides. Science, 2010, vol. 330, pp. 1660–1663.

2. Heremans J. P., Jovovic V., Toberer E. S. et al. Enhancement of thermoelectric efficiency in PbTe by distortion of the electronic density of states. Science, 2008, vol. 321, p. 554.

3. Chitra Devi S., Sowmiya Devi B., Balu A. R., Devendran K., Suganya M., Sriramraj M. Improved Haacke's quality factor, third-order nonlinear susceptibility and specific capacitance realized for PbS thin films through La^{3+} doping. Ceramics International, 2023, vol. 49, iss. 21, pp. 33793–33803.

4. Markov V. F., Maskaeva L. N., Mostovshchikova E. V., Voronin V. I., Pozdin A. V., Beltseva A. V., Selyanin I. O., Baklanova I. V., Anokhina I. A. The influence of iodide addition on the composition, morphology, crystal structure, and semiconductor and photoelectric properties of PbS films. Physical Chemistry Chemical Physics, 2022, vol. 24, iss. 26, pp. 15890–15902.Влияние последовательности кислотной очистки и термоокисления детонационного наноалмаза на устойчивость его водных дисперсий

Влияние последовательности кислотной очистки и термоокисления детонационного наноалмаза на устойчивость его водных дисперсий

***Болатов А.*[1], *Водолажский В.А.*[1], *Ермакова Л.Э.*[1], *Волкова А.В.*[1]**

e-mail: st112268@student.spbu.ru
[1]*ФГБОУ ВО «Санкт-Петербургский государственный университет», Санкт-Петербург, Россия*

Детонационные наноалмазы (ДНА) представляют собой перспективный класс углеродных наноматериалов благодаря сочетанию высокой химической стабильности, развитой удельной поверхности и биосовместимости. В последние годы ДНА активно рассматриваются для применения в биомедицине (системы адресной доставки лекарств, флуоресцентные биомаркеры), катализе, сенсорике и создании функциональных композиционных материалов [1-3]. Однако практическая реализация этих направлений, в том числе возможность получения устойчивых нанозолей ДНА, существенно ограничена неоднородностью химического состава поверхности и наличием примесей, обусловленных условиями детонационного синтеза [4, 5]. В связи с этим задача унификации, очистки поверхности ДНА и получения воспроизводимых по свойствам образцов остается актуальной. Целью настоящей работы являлось исследование влияния последовательности термоокисления и кислотной обработки на состав поверхности и электрокинетические свойства частиц ДНА, а также устойчивость их водных дисперсий.

В качестве объекта исследования был выбран порошок детонационного наноалмаза, выделенного из шихты стандартным способом и подвергнутого дополнительной амиачной обработке (образец АН) (ФГУП СКТБ «Технолог», Санкт-Петербург). Унификация поверхности осуществлялась комбинацией термоокисления в потоке воздуха (450 °С, 5 ч) и кислотной обработки смесью концентрированных HNO_3 и H_2SO_4 в объемном соотношении 1:3 в различной последовательности.

Состав поверхносных групп и фазовый состав анализировали методами ИК-Фурье спектроскопии и рентгенодифракционного анализа. Элементный состав определяли методом рентгенофлуоресцентной спектроскопии. Электрокинетические свойства (ζ-потенциал, изоэлектрическая точка (ИЭТ)) исследовали методом лазерного допплеровского электрофореза.

Показано, что кислотная обработка исходного образца АН приводит к существенному удалению железосодержащих примесей, однако содержание трудноудаляемого титана меняется не значительно. В случае последовательности термоокисления, после которой проводилась кислотная обработка наблюдается значительное снижение содержания титана по сравнению с обработкой исходного образца. Вероятно, термоокисление способствует дезагрегации частиц и повышению доступности примесей для последующего удаления.

ИК-спектроскопия показала формирование на поверхности образцов в результате обработки кислородсодержащих функциональных групп (C=O, C–O, C–O–C), при этом термоокисленные образцы характеризуются более выраженным вкладом карбонильных групп, что свидетельствует о более глубоком окислении поверхности.

Установлено, что последовательность обработки существенно влияет на электрокинетические свойства. Для исходного образца АН $pH_{ИЭТ}$ = 8.4, тогда как после кислотной обработки ИЭТ смещается до 6.1 ед. pH. Для термоокисленных образцов наблюдается резкое смещение ИЭТ в кислую область (pH = 1-1.6), что связано с увеличением содержания карбоксильных групп и унификацией поверхности. Минимальное значение ИЭТ достигается при последовательности «кислотная обработка – термоокисление», что также сопровождается повышением абсолютных значений ζ-потенциала в широком диапазоне значений pH.

Показано, что кислотная обработка термоокисленного образца приводит к дополнительной агрегации частиц и невозможности приготовления на его основе нанозоля ДНА. Агрегативно устойчивый водный нанозоль детонационного наноалмаза со средним размером первичных частиц 8 и 62 нм (по данным динамического рассеяния света) был получен с использованием термооксиленного и предварительно очищенного кислотами порошка ДНА. Показано также, что электрокинетические свойства, пороги медленной и быстрой коагуляции, определеннные методом турбидиметрии, и которые составили для исследуемого золя 3×10^{-2} М и 7.5×10^{-2} М, близки к таковым для коммерческого нанозоля ДНА, предоставленного ФГУП СКТБ «Технолог», Санкт-Петербург.

Таким образом, показано, что последовательность термоокисления и кислотной обработки является одним из ключевых факторов, определяющим степень очистки, химический состав поверхности и электрокинетические свойства ДНА. Полученные результаты имеют важное значение для разработки методов получения стабильных водных золей наноалмазов с контролируемой поверхностью, востребованных в задачах биомедицины, катализа и создания функциональных наноматериалов.

Исследования проведены с использованием оборудования Ресурсных центров Научного парка СПбГУ «Оптическое и лазерные методы исследования вещества», «Рентгенодифракционные методы исследования», «Инновационные технологии композиционных материалов».

Финансирование: работа выполнена при поддержке СПбГУ, рег. номер ЕГИСУ НИОКТР: 125021702335-5.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Schrand A. M., Hens S. A. C., Shenderova O. A. Nanodiamond particles: Properties and perspectives for bioapplications. Critical Reviews in Solid State and Materials Sciences, 2009, vol. 34, № 1–2, pp. 18–74.

2. Alexander V., Olga S. Detonation nanodiamonds / Ed. by Vul’ A., Shenderova O. Jenny Stanford Publishing, 2014.

3. Ho D. Nanodiamonds: Applications in biology and nanoscale medicine / Ed. by Ho D. Boston, MA: Springer US, 2010.

4. Dolmatov V. Y. Detonation-synthesis nanodiamonds: Synthesis, structure, properties and applications. Russian Chemical Reviews, 2007, vol. 76, № 4, pp. 339–360.

5. Волков К. В., Даниленко В. В., Елин В. И. Синтез алмаза из углерода продуктов детонации ВВ. Физика горения и взрыва, 1990, т. 26, № 3, с. 123–125

Сравнение газофазного и жидкометаллического методов получения углеродных нанотрубок термокаталитическим разложением метана

***Васин Д.А.*[1], *Кудинов И.В.*[1]**

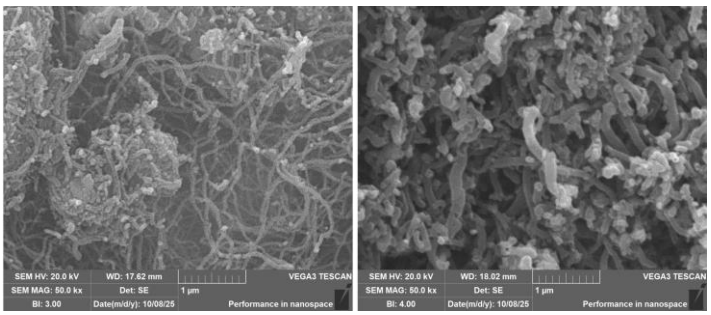
e-mail: denis_vasin_23@mail.ru
[1]*ФГБОУ ВО «Самарский государственный технический университет»*

Существует несколько промышленных способов производства водорода: паровой риформинг метана, частичное окисление углеводородов, газификация угля, электролиз воды. Все эти методы сопровождаются выбросами CO/CO_2. Более экологичными являются термокаталитические методы разложения метана, так как в результате их реализации образуется только газообразный водород и твердые углеродные частицы. При термокаталитическом разложении на поверхности катализатора появляются твердые углеродные частицы (нанотрубки, волокна, аморфный углерод). Активно развивается технология пиролиза CH_4 в жидких металлах, позволяющая существенно увеличивать время работы катализаторов до дезактивации и упростить задачу удаления углеродных частиц. Цель данного исследования: сравнить качество получаемых углеродных продуктов для газофазного и жидкометаллического методов.

Для проведения термокаталитического процесса разложения метана в газовой фазе и жидком металле были разработаны никелевые и медно-никелевые катализаторы, полученные золь-гель методом: $82Ni/8Cu/10Al_2O_3$, $85Ni/15Al_2O_3$, $90Ni/10Al_2O_3$. Экспериментальные исследования проводились в температурном диапазоне от 550 °C до 750 °C при постоянном расходе метана 5 л/ч, давлении в реакционной зоне 2 бар и массе катализатора $m_{кат}$ = 100 мг. В качестве жидкого металла выступал расплав висмута. После проведения экспериментов, полученные углеродные образцы были проанализированы разными методами: сканирующая электронная микроскопия (СЭМ), рентгеноспектральный и КР-спектральный анализ.

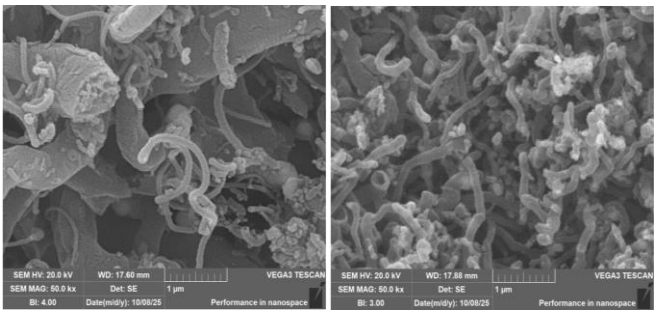
Из рисунков 1–3 (а) видно, что после испытаний в газовой фазе поверхность катализаторов полностью покрыта извилистыми углеродными волокнами. На катализаторах $82Ni/8Cu/10Al_2O_3$ (Рис. 1 (а)) и $90Ni/10Al_2O_3$ (Рис. 3 (а)) углеродные нанотрубки имеют средний диаметр порядка 40–100 нм. На поверхности катализатора $85Ni/15Al_2O_3$ наблюдаются углеродные волокна двух видов: крупные волокна с диаметром около 1–5 мкм и мелкие нанотрубки с диаметром 40–100 нм (Рис. 2 (а)). КР-спектральный анализ показал высокую однородность и небольшую дефектность полученных углеродных образцов.

В результате пиролиза метана в расплаве металла катализаторы $82Ni/8Cu/10Al_2O_3$ и $85Ni/15Al_2O_3$ покрыты нанотрубками с диаметром 50–150 нм (Рис. 1, 2 (б)). При этом на катализаторе $90Ni/10Al_2O_3$ одновременно наблюдаются крупные прямые волокна диаметром 1–10 мкм и мелкие извилистые УНТ диаметром 50–150 нм (Рис. 3 (б)). С помощью локального микрорентгеноспектрального анализа установлено, что крупные волокна — это сложные алюмосиликаты, вероятно муллит, поскольку содержат около 60 ат.% кислорода, 17 ат.% алюминия и 16 ат.% кремния. Катализаторы после испытаний в расплаве висмута загрязнены частицами алюминия, кремния, никеля, висмута и их оксидов, общая массовая доля которых может достигать 30–50 мас.% . КР-спектры углеродного продукта в расплаве висмута характеризуются широкими пиками D и G, а также большим количеством побочных пиков, шумов. Это говорит о большой степени загрязненности продукта.



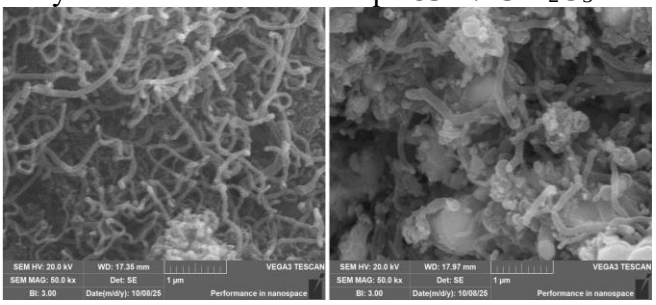
(а) (б)

Рис. 1 СЭМ углерода, полученного на катализаторе 82Ni/8Cu/10Al_2O_3 в газе (а) и висмуте (б)



(а) (б)

Рис. 2 СЭМ углерода, полученного на катализаторе 85Ni/15Al_2O_3 в газе (а) и висмуте (б)



(а) (б)

Рис. 3 СЭМ углерода, полученного на катализаторе 90Ni/10Al_2O_3 в газе (а) и висмуте (б)

Таким образом, исследование углеродного продукта методом сканирующей электронной микроскопии показало, что и для газофазного пиролиза, и для жидкометаллического на всех трех катализаторах образуются наноструктурные углеродные материалы – извилистые нанотрубки диаметром 50 ÷ 150 нм и крупные прямые волокна диаметром от 1 ÷ 10 мкм. Рентгеноспектральный и КР-спектральный анализ показал большое количество металлических примесей для жидкометаллического пиролиза (43,3 ÷ 54,3 %) в отличие от пиролиза в газовой фазе (2,6 ÷ 9,5 %).

Благодарности. Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (тема № FSSE-2024-0014) в рамках государственного задания Самарского государственного технического университета (создание новых молодёжных лабораторий).

Методика металл-индуцированной лазер-стимулированной кристаллизации кремниевых пленок на гибких полимерных подложках

Сердобинцев А.А.[1], ***Волковойнова Л.Д.***[1], ***Вениг С.Б.***[1]

e-mail: alexas80@bk.ru
[1]*ФГБОУ ВО «СГУ имени Н. Г. Чернышевского», Саратов, Россия*

Покрытия и тонкие плёнки на основе кремния используются уже длительное время и имеют широкий ряд применений. Совершенствование технологий и появление новых запросов общества приводят к возникновению новых областей развития, таких как гибкая электроника. Она находит свое применение в создании, например, конденсаторов [1], датчиков и даже электронной кожи [2]. Предпочтительнее в подобных устройствах использовать поликристаллический кремний, поскольку он позволяет создавать устройства с большей эффективностью, чем аморфный [3].

Известно, что большинство доступных методов получения кремниевых плёнок позволяют формировать аморфные плёнки и покрытия. При разработке гибких электронных устройств на основе поликристаллического кремния возникает проблема: температура кристаллизации кремния выше, чем температура плавления большинства гибких подложек. Для преодоления этого технологического барьера предлагается использовать оригинальную методику металл-индуцированной лазер-стимулированной кристаллизации (МИЛС).

Данная методика объединяет в себе преимущества двух методик кристаллизации кремния: металл-индуцированной (МИК) и лазер-индуцированной (ЛИК) кристаллизации. Суть МИЛС заключается в облучении двухслойной структуры металл/кремний инфракрасным импульсным излучением с длиной волны 1064 нм. Металл и кремний наносятся на полиимидную подложку методом магнетронного напыления. Напыленный на аморфный кремний металл выступает в роли поглощающего слоя, поскольку, на данной длине волны кремний и полиимид практически не поглощают. Поверхностный слой металла поглощает энергию лазерного излучения и передает ее кремнию путем теплопередачи. В процессе лазерного облучения металл частично аблирует с поверхности кремния. Использование металлов, которые применяются в методике МИК, позволяет снизить температуру кристаллизации кремния.

В работе были апробированы металлы с разными механизмами взаимодействия с кремнием: образующие с Si эвтектику (Al, Sn), образующие с Si соединения (Ni) [4], а также тугоплавкие металлы (Mo, W).

Основным методом оценки степени кристалличности кремния после МИЛС в настоящей работе является метод комбинационного рассеяния света (КРС). Он позволяет выделить в кремнии три характерные фазы: аморфную, кристаллическую и промежуточную фазу нанокристаллического кремния.

На (рис. 1, а) приведены спектры КРС для образцов с разными металлами поглощающего слоя, которые показали наилучшую кристаллизацию. Пунктиром обозначено положение пика, характерное для монокристаллического кремния. Образцы, у которых положение пика наиболее близко к этому значению, были получены с использованием алюминия и олова, то есть эвтектических металлов.

На основе образцов с алюминием в качестве поглощающего слоя был предложен механизм взаимодействия лазерного излучения инфракрасного диапазона с двуслойной системой кремний-алюминий на полиимидной подложке. На (рис. 1, б) приведено схематичное изображение всех этапов данного взаимодействия.

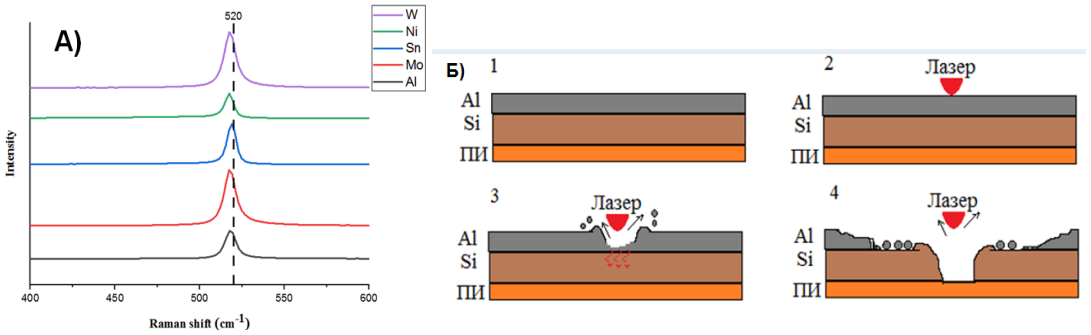


Рис. 1. Спектры КРС для образцов с разными металлами (а), механизм взаимодействия излучения с двухслойной структурой (б)

При воздействии излучения на поверхность слоя алюминия металл поглощает энергию и начинает аблировать (испаряться). При этом алюминий передает энергию кремнию, который находится под ним. На границе с полиимидом образуется валик застывшего кристаллизованного кремния, поскольку абляции проходит по механизму нормального испарения. Кремний кристаллизуется под воздействием тепла, переданного алюминием. При удалении от центра линии структура кремния постепенно переходит от поликристаллической к аморфной. Частички испаренного алюминия остывают в воздухе и осаждаются обратно на образец на некотором удалении от места воздействия лазера.

Таким образом, в настоящей работе было проведено исследование процесса металл-индуцированной лазер-стимулированной кристаллизации кремния. Были апробированы металлы с разными механизмами взаимодействия с кремнием. Иследования позволили выявить, что наилучшие показатели кристаллизации кремния можно получить при использовании металлов, образующих с кремнием эвтектику. Также был предложен механизм воздействия инфракрасного лазерного излучения с двухслойной структурой на основе образцов со слоем алюминия.

Финансирование: Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 23-22-00047, https://rscf.ru/project/23-22-00047/.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Dong X., Chen L., Su X., Wang Y., Xia Y. Flexible aqueous lithium-ion battery with high safety and large volumetric energy density. Angew Chem. Int. Ed. Engl., 2016, vol. 55, pp. 7474–7477.

2. Chortos A., Liu J., Bao Z. Pursuing prosthetic electronic skin. Nat. Mater. 2016, vol. 15, pp. 937–950.

3. Kang H. Crystalline Silicon vs. Amorphous Silicon: the Significance of Structural Differences in Photovoltaic Applications. IOP Conf. Ser.: Earth Environ. Sci. 2021, vol. 726.

4. Zumin, W. Metal-Induced Crystallization: Fundamentals and Applications / W. Zumin, L. Jeurgens. – Stanford : Pan Stanford Publishing, 2015. – 315 p.

Исследование фильтрующей способности мембран из углеродных нанотрубок, модифицированных наночастицами TiO_2

Виноградова Л.М.[1], Нежданов А.В.[1], Шестаков Д.В.[1], Скрылев А.А.[1], Ершов А.В.[1], Машин А.И.[1], De Filpo G.[2], Baratta M.[2]

e-mail: lidiya.vinogradova@unn.ru

[1]ННГУ «Национальный исследовательский Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского», Нижний Новгород, Россия

[2]CTC «Dipartimento di Chimica e Tecnologie Chimiche», Università della Calabria, Rende, Cosenza, Italy

В наше время диоксид титана (TiO_2) в кристаллической фазе анатаза используется в качестве фотокатализатора для решения проблем, связанных с загрязнениями окружающей среды, в частности, для очистки сточных вод. Известно, что для осуществления фотокаталитической реакции требуется наличие излучения (солнечного света или ультрафиолетового излучения) с энергией фотона, соответствующей или превышающей оптическую ширину запрещенной зоны катализатора, и наличие наночастиц самого катализатора. Одним из вариантов применения диоксида титана в качестве фотокатализатора является осаждение кристаллических наночастиц (средний размер кристаллитов менее 30 нм) на такие фильтрующие системы (рис. 1), как мембраны из углеродных нанотрубок (УНТ).

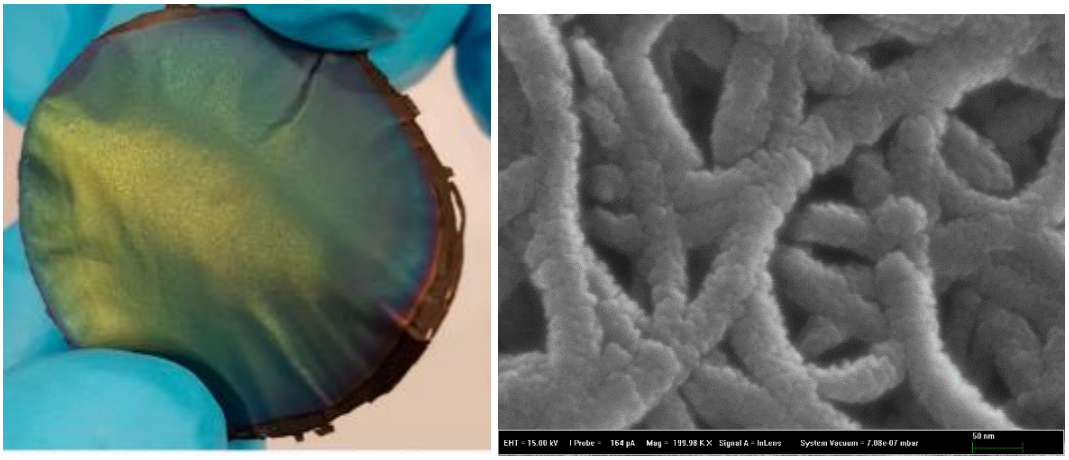


Рис. 1. Мембрана из УНТ с нанесенным слоем TiO_x после отжига.

В настоящей работе плёнки TiO_x были получены методом электронно-лучевого испарения в вакууме на подложках из КДБ-12 (100) и на мембранах из углеродных нанотрубок. Структурные исследования показали, что отжиг аморфных плёнок TiO_x в диапазоне температур 300 – 450 °C в течение 5 часов приводит к образованию TiO_2 в кристаллической фазе анатаза в приповерхностном слое [1].

В рамках исследования фотокаталитической активности (ФКА) наночастиц TiO_2, полученных при различных температурах, использовались фильтрующие системы на основе мембран из УНТ. Для оценки их эффективности была проведена серия экспериментов по разложению красителя метиленового синего (МС) под воздействием излучения от имитатора солнечного света Oriel Sol1A в течение 30 минут. Для определения концентрации красителя после проведения эксперимента был построен калибровочный график на основе нескольких стандартных растворов с известным содержанием определяемого вещества и их спектров поглощения.

Эксперимент показал, что эффективность фотокаталитического разложения метиленового синего у мембран, модифицированных нанокристаллами TiO_2, разная. Наилучший результат показала плёнка TiO_x, отожжённая при 300 °C. Ухудшение ФКА

наночастиц диоксида титана с повышением температуры отжига может быть связано с увеличением ширины запрещённой зоны, что изменяет оптическую активность материала в УФ-область и снижает эффективность генерации электрон-дырочных пар. Также было обнаружено, что хранение плёнок более двух месяцев приводит к ухудшению их ФКА. Это может быть связано с условиями хранения и «старением» образцов [2]. В таблице 1 приведены полученные концентрации растворов после реакции фотокатализа до и после процесса «старения». На основании данных комбинационного рассеяния света и фотолюминесценции причинами снижения фотокаталитической активности плёнок TiO_x, при длительном хранении, может быть, как уменьшение доли кристаллической фазы, так и уменьшение количества вакансий кислорода в них.

Таблица 1. Результаты определения концентрации содержания метиленового синего в водных растворах после проведения эксперимента по фотокатализу

	Концентрация МС до деградации × 10^{-6}, моль/л	Концентрация МС после полугода хранения × 10^{-6}, моль/л
Исходный раствор	3,80 ± 0,09	3,77 ± 0,09
Раствор МС после реакции ФК с плёнкой, отожжённой при 400 °C	2,78 ± 0,09	3,31 ± 0,09

Фильтрующая способность наночастиц TiO_2 после длительного хранения не восстанавливается УФ-засветкой, в то время как термический отжиг приводит к регенерации фотокаталитической активности кристаллитов до исходного состояния.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Nezhdanov A.V., Zhukov A. O., Shestakov D. V., Vinogradova L. M., Skrylev A. A., Ershov A. V., Pavlov D. A., Andrianov A. I., Markelov A. S., De Filpo G., Baratta M., Mashin A. I. Effect of the Annealing Conditions on the Formation of a Nanocrystalline Phase in TiOx. J. Surf. Invest.: X-Ray, Synchrotron Neutron Tech, 2023, vol. 10, pp. 41–46.

2. Kim J. S., Joo H. K., Lee T. K., Itoh K., Murabayashi M. Photocatalytic Activity of TiO2 Films Preserved under Different Conditions: The Gas-Phase Photocatalytic Degradation Reaction of Trichloroethylene. Journal of Catalysis, 2000, vol. 194, №. 2, pp. 484–486.

Исследование свободной поверхностной энергии на границе раздела сред: фторид магния MgF_2-углеродные нанотрубки

Воробьев А. С.[1,2]***, Каманина Н. В.***[1,2,3]

e-mail: vorobevanton1285@gmail.com

[1]*Петербургский институт ядерной физики им. Б.П. Константинова, НИЦ "Курчатовский институт", Гатчина, Ленинградская обл., Россия*

[2]*Санкт-Петербургский государственный электротехнический университет "ЛЭТИ" им. В. И. Ульянова (Ленина), Санкт-Петербург, Россия*

[3]*АО "НПО Государственный оптический институт им. С.И. Вавилова", Санкт-Петербург, Россия*

Хорошо известно, что фторид магния (MgF_2) относится к классу оптических материалов, обладающих уникальной прозрачностью в широком спектральном диапазоне — от глубокого ультрафиолета (110 нм) до среднего инфракрасного (порядка 10 мкм) [1]. Данная особенность обусловливает его широкое применение в качестве защитных и выходных окон для УФ-ламп, используемых в медицинской технике, а также в различных оптоэлектронных устройствах. В последние годы активно исследуются методы модификации поверхности таких кристаллов углеродными наноструктурами. В частности, осаждение углеродных нанотрубок (УНТ) на подложки MgF_2 позволяет не только повысить абразивную прочность материала [2], но и создать большее согласование коэффициента преломления подложки с окружающей средой, что снижает френелевские потери излучения. В этой связи, комплексное изучение свойств границы раздела «кристалл MgF_2 – углеродные нанотрубки является актуальной задачей, результаты которой важны для прогнозирования поведения материала в различных климатических и эксплуатационных условиях.

В качестве объекта исследования выступали подложки фторида магния, а также их поверхность, модифицированная углеродными нанотрубками. Нанесение УНТ осуществлялось методом лазерного ориентированного осаждения с применением электрического поля напряженностью 100 В/см [2]. Выбор данного метода обусловлен возможностью бесконтактного нанесения нанотрубок без использования токсичных растворителей. Учитывая геометрию эксперимента (расположение шести подложек на держателе относительно центра осаждения), логично предположить неравномерность распределения нанотрубок по поверхности. Для учета этого фактора каждая подложка с нанесенным покрытием была разделена на четыре квадранта, и исследование проводилось для каждого из них отдельно.

Методика исследования базировалась на тензиометрическом подходе. Измерение краевых углов смачивания выполнялось на оптическом комплексе OCA 15EC с использованием трех тестовых жидкостей: дистиллированной воды, изопропилового спирта и их смеси в соотношении 1:1. Применение раствора позволило нивелировать чрезмерное растекание чистого спирта и повысить точность измерений. Расчет полярной и дисперсионной составляющих свободной поверхностной энергии (СПЭ) производился методом OWRK (Оуэнса-Вендта-Рабеля-Каэльбе) [3]. Важно отметить, что в ходе работы были уточнены значения поверхностного натяжения для раствора вода-спирт, так как литературные данные по фракционному составу для данной смеси разнятся.

В результате эксперимента были сформированы выборки данных (по 10 измерений на каждую точку), позволившие рассчитать значения СПЭ для чистого кристалла и для каждого квадранта модифицированной поверхности. Установлено, что нанесение углеродных нанотрубок приводит к существенному изменению энергетических характеристик поверхности. На участках с предполагаемой максимальной частотой осаждения (с учетом предполагаемых погрешностей измерений, что отражено на рис. 1, зафиксирован рост

полярной составляющей СПЭ до 4,37 мДж/м², что в 2,25 раза выше, чем у чистой подложки, что показано на рис. 2, и коррелирует с увеличением шероховатости поверхности, вызванным формированием «леса» нанотрубок.

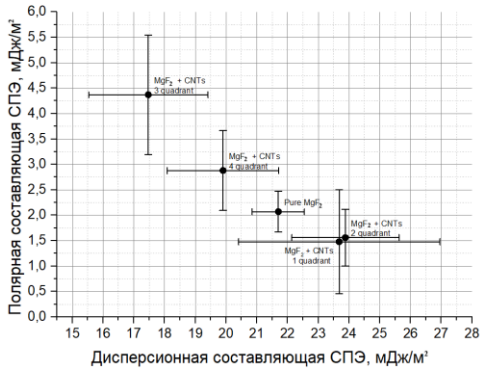


Рис. 1. Определение квадранта с наибольшей частотой УНТ

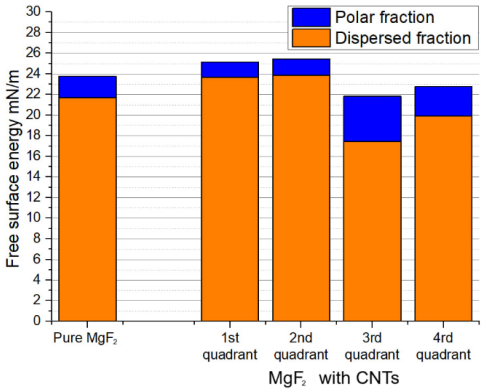


Рис. 2. СПЭ на чистом MgF_2 и на подложке, модифицированной УНТ

Полученные результаты демонстрируют, что модификация поверхности фторида магния углеродными нанотрубками методом лазерного ориентированного осаждения делает поверхность более гидрофильной для полярных жидкостей, но более гидрофобной для дисперсионных, что выражается в изменении полярной и дисперсионной компоненты СПЭ соотвественно. Выявленная неравномерность распределения нанотрубок по поверхности подложки требует обязательного учета данного факта при разработке конкретных оптических устройств и датчиков, работающих в условиях внешних воздействий. Установленные закономерности изменения полярной и дисперсионной составляющих СПЭ могут быть использованы при создании защитных износостойких покрытий и просветляющих слоев с заданными адгезионными свойствами.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Kamanina N. V., Likhomanova S. V., Zubtsova Yu. A. et al. Surface modification of materials using laser-oriented nanostructuring. Journal of Optical Technology, 2018, vol. 85, № 11, pp. 722–728.

2. Каманина Н. В., Богданов К. Ю., Васильев П. Я., Студенов В. И. Нанотрубки, нанесённые на поверхность, увеличивают её прочность и прозрачность. Российские нанотехнологии, 2009, т. 4, № 9–10, с. 31.

3. Owens D. K., Wendt R. C. Estimation of the surface free energy of polymers. Journal of Applied Polymer Science, 1969, vol. 13, № 8, pp. 1741–1747.

Фотокаталитическое производство водорода с использованием титансодержащих нанотрубок со структурой хризотила $Mg_3Si_2O_5(OH)_4$, синтезированных с добавлением $SiO_2 \cdot nTiO_2$

***Гатина Э.Н.*[1], *Храпова Е.К.*[3], *Курносенко С.А.*[4], *Осминина А.А.*[1,2,3], *Жидоморова К.А.*[1,2,3]**

e-mail: gatina.en@iscras.ru
[1]*Филиал НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ – ИХС, Санкт-Петербург, Россия*
[2]*СПбГТУ(ТИ), Санкт-Петербург, Россия*
[3]*ФТИ им. А. Ф. Иоффе, Санкт-Петербург, Россия*
[4] *Институт химии Санкт-Петербургского государственного университета, Санкт-Петербург, Петергоф, Россия*

Неорганические гидросиликатные нанотрубки применяются для очистки воды от радиоактивных загрязнений и тяжелых металлов, а также для укрепления композитов, повышая их механические свойства и термостойкость, улучшает защиту от нейтронного излучения. Известны исследования по заполнение нанотрубок свинцом, селеном, оловом [1]. За счет особенностей кристаллического строения, пустого канала и относительно высокой удельной площади поверхности трубчатая основа дает возможность для допирования кристаллической структуры [2], заполнения канала трубок [3], сорбирования веществ на поверхности и внесение в межслоевые пространства. Композитные фотокатализаторы с частицами благородных металлов, таких как платина и золото, повышают эффективность. Известны фотокатализаторы на основе природных нанотрубок галлуазита [4].

Синтез кремний-титановой оксидной смеси осуществлялся с использованием тетраэтоксиксилана (ТЭОС) 98% и тетрабутоксититана (ТБТ) 98%. Гидролиз проводился в водно-аммиачной атмосфере в эксикаторе на 3 л в круглодонных фарфоровых чашах в соотношениях 1мл:9мл (8 мол.% Ti) и 5мл:5мл (40 мол.% Ti), чтобы суммарный объем смеси был равен 10 мл. По завершению гидролиза образцы сушились в течение 48 ч при комнатной температуре, затем выдерживались в сушильном шкафу при 90˚С, после этого прокаливались в кварцевом реакторе при 850˚С (скорость нагрева 10 град/мин) в потоке воздуха в течение 1 часа. Для синтеза нанотрубок гидросиликата магния использовались смесь оксидов магния и кремния, взятых на стехиометрию хризотила $Mg_3Si_2O_5(OH)_4$. Для синтеза титансодержащих нанотрубок гидросиликата магния добавляли к оксиду магния кремний-титановой оксид $SiO_2 \cdot 8\%TiO_2$ с учетом воды и стехиометрии хризотила без обжига (Образец № 1), после обжига 850˚С (Образец № 2) и оксид $SiO_2 \cdot 40\%TiO_2$ (Образец № 3). Титаноксидный компонент пробовали добавлять к исходной смеси в количестве 0.4 мол. % на 1 г нанотрубок (Образец № 4) и при обратном осаждении гидроксида магния (Образец № 5). Последний метод был испробован для равномерного смешения реактивов в процессе промывки от Cl-ионов. Смеси подвергали гидротермальной обработке в щелочной среде при условиях: температура – 350 °С, давление - 70 МПа, изотермической выдержки - 24 ч. Продукты синтеза промывались до нейтральной реакции и были высушены при температуре 100 °С.

Экспериментальные данные показали, что при использовании в качестве добавки кремний-титанового оксида $SiO_2 \cdot TiO_2$ 8% в реакционную смесь приводит к образованию нанотрубок гидросиликата магния и большого количества сепиолита. Данный образец показал степень фотодеградации метиленового в диапазоне от 20 до 40 % за 2-2.5 часа УФ-воздействия, что объяснимо наличием анатаза (не более 5 мол. %).

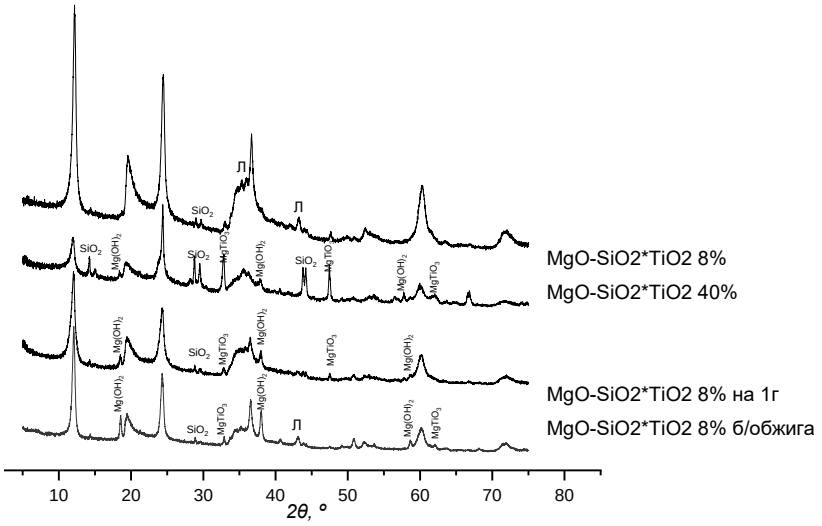


Рис. 1. Рентгеновские дифрактограммы образцов синтезированных гидросиликатов магния с добавлением 0.1 г на 1 г $Mg_3Si_2O_5(OH)_4$ при 350 °C. Не обозначена фаза нанотрубок $Mg_3Si_2O_5(OH)_4$ со структурой хризотила (JCPDS 43-662). На дифрактограммах отмечены: фаза титаната магния $MgTiO_3$ (JCPDS 6-494), фаза брусита $Mg(OH)_2$ (JCPDS 44-1482) и SiO_2 (*ICSD* 24259)

Эффективность фотокаталитической генерации водорода в исследуемых образцах с использованием и добавлением геля оказалась относительно низкой, значение фотокаталитической активности для образца системы $MgO\text{-}SiO_2 \cdot TiO_2$ без обжига и после обжига 850˚C составило φ = 0.016%, φ = 0.021%, а для системы $MgO\text{-}SiO_2\text{-}SiO_2 \cdot 8\%TiO_2$ — φ = 0.029%), но после модификации поверхности Pt-сокатализатором фотокаталитическая активность обоих образцов значительно возросла до φ = 0.141 %, φ = 1.204% и φ = 0.356 %, соответственно. Значение ширины запрещеной зоны для образца № 2 составило 3.35 эВ и для оксида $SiO_2 \cdot TiO_2$ 8% 3.65 **эВ.** Таким образом, более «чистый» титансодержащий гидросиликат магния, содержащий хризотил 84 мас. %, лизардит 15 мас. %, является активным фотокатализатором за счет Pt-частиц, локализующихся на поверхностях трубок.

Финансирование: Работа выполнена в рамках государственного задания филиала НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ – ИХС, тема 1023032900322-9-1.4.3.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Chernyaev A. V., Mikhailin N. Y., Shamshur D. V., Kumzerov Yu. A., Fokin A. V., Kalmykov A. E. et al. Electrical and magnetic properties of Pb and In nanofilaments in asbestos near the superconducting transition. Phys. Solid State, 2018, vol. 60, pp. 1935–1941.

2. Korytkova E. N., Pivovarova L. N. Hydrothermal synthesis of nanotubes based on $(Mg,Fe,Co,Ni)_3Si_2O_5(OH)_4$ hydrosilicates. Glas. Phys. Chem., 2010, vol. 36, № 1, pp. 53–60.

3. Gatina E. N., Maslennikova T. P. Formation of chrysotile nanotubes with titania in the internal channel. Nanosystems: Phys. Chem. Math., 2024, vol. 15, № 3, pp. 380–387.

4. Gourav M., Mausumi M. TiO_2 decorated functionalized halloysite nanotubes (TiO_2@HNTs) and photocatalytic PVC membranes: Synthesis, characterization and its application in water treatment. Scientific Reports, 2019, vol. 9, p. 4345.

Нейроинтерфейсы на основе лазерно-индуцированных углеродных наноматериалов

Герасименко А.Ю.[1,2], Мурашко Д.Т.[1], Курилова У.Е.[1,2], Савельев М.С.[1]

e-mail: gerasimenko@bms.zone

[1]Институт биомедицинских систем, Национальный исследовательский университет «МИЭТ», Москва, Зеленоград, Россия

[2]Институт бионических технологий и инжиниринга, Первый Московский государственный медицинский университет им. И. М. Сеченова, Москва, Россия

В связи с резким увеличением числа патологий нервной системы в последнее время активно развиваются имплантируемые микроэлектронные приборы, способные взаимодействовать с нервными тканями для выявления нарушений их терапии. Такие устройства должны создавать прямые каналы обмена сигналами между тканью и прибором в обе стороны. Для этого применяются физические воздействия, которые в определённых материалах, называемых нейроинтерфейсами, трансформируются в электрический сигнал. В фотоактивных полупроводниках под действием света изменяется подвижность или концентрация носителей заряда. Материалы, содержащие магнитные наночастицы, при внесении во внешнее магнитное поле стремятся ориентироваться по направлению поля, что приводит к перераспределению зарядов в пространстве и возникновению внутреннего электрического поля. При механической деформации пьезоэлектрика структура его кристаллической решётки меняется, вызывая смещение положительных и отрицательных зарядов и появление электрического потенциала. Однако наибольшую эффективность демонстрируют электропроводящие полимерные композиционные материалы с наночастицами или тонкоплёночные материалы, обеспечивающие непосредственную электрическую связь с нервной тканью [1].

Поскольку свойства поверхности нейроинтерфейсов критически важны для их совместимости с нервной тканью, регистрации биоэлектрических сигналов и электростимуляции, то предложено использовать композиционные материалы на основе углеродных наноструктур – нанотрубок, графена. Углеродные наноматериалы, имеющие размеры до 10 нм сопостовимы по размеру с отростками нейронов – дендритов и аксонов. Поэтому структурно неанотрубки возможно сопоставить с аксонами, передающими электрические сигналы от тела клетки к другим нейронам (потенциалы действия), а листы графена с постсинаптическими мембранами, воспринимающими химический сигнал от соседних клеток. Такое совпадение масштабов позволяет контактировать без грубого нарушения архитектуры живой ткани [2, 3]. В нервной системе используется ионная проводимость, в то время как нанотрубки и графен являются эффективными проводниками электрического тока. Однако их ценность в том, что они способны выступать в роли связующего звена, эффективно конвертируя ионные сигналы нейронов в электронные, необходимые для микроэлектронных устройств и наоборот. Именно это позволяет использовать их для высокоточной регистрации и стимуляции нейронной активности [4]. Более того, их применение в нейроинженерии не ограничивается пассивной передачей сигнала. В регенеративной медицине каркасы на основе углеродных наноматериалов не только поддерживают, но и активно направляют рост нейритов, способствуя формированию новых связей в поврежденных нервах. Нервная ткань является одной из наиболее мягких в организме, поэтому традиционные электроды травмируют нейроны и вызывают глиоз (разрастание рубцовой ткани), а углеродные наноматериалы обладают высокой гибкостью и прочностью на разрыв. При этом тонкние плёнки из нанотрубок или графена могут облегать нейрон не разрушая его [3]. Это свойство позволяет нейроинтерфейсам адаптироваться к

микродвижениям мозга или спинного мозга, не разрушая нейроны и глиальные клетки, что открывает путь к созданию долговременных имплантатов.

Ключевыми достоинствами нейроинтерфейсов на основе углеродных наноматериалов являются высокая пространственная избирательность, повышенное разрешение и увеличенная ёмкость инжекции заряда. Для достижения высокой эффективности переноса заряда и низкого импеданса определены условия создания мультимасштабной поверхности электродной матрицы с учётом ограниченности пространства в спинном мозге. Предложены методы лазерной обработки, позволяющие формировать упорядоченные микроструктуры на металлической поверхности, а также создавать наноструктуры из углеродных нанотрубок и графеновых листов с регулируемой архитектурой, в том числе внутри полимерной или биополимерной матрицы [4–6]. Полученные поверхности нейроинтерфейсов, обладающие сложной атомно-молекулярной топографией на макро-, микро- и наноуровне с высокой плотностью носителей заряда, обеспечили надёжную передачу электрических импульсов при ёмкости хранения заряда ~82 мКл/см² и ёмкости инжекции заряда ~2 мКл/см².

Для подведения заряда с целью генерации потенциала действия без повреждения клеток необходим плотный контакт между поверхностью интерфейса и нервной тканью, а также взаимное структурное соответствие. Электродные покрытия на основе нанотрубок показали хорошую совместимость с клетками нервной системы. В случае покрытия из нанотрубок в альбуминовой матрице через 72 часа инкубации количество клеток нервной ткани на 30 % выше по сравнению с контрольным образцом. Предложенные композиционные структуры со сложной атомно-молекулярной топологией являются перспективной основой для создания имплантируемых нейроинтерфейсов.

Финансирование: Работа выполнена в рамках крупного научного проекта Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (Соглашение No. 075-15-2024-555 от 25 апреля 2024 года).

Благодарности: Работа выполнена с использованием оборудования Центра коллективного пользования «Центр лазерных технологий в медицине» при поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (Соглашение № 075-15-2025-669 от 05 августа 2025 г.)

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Gelmi A., Schutt C. E. Stimuli-Responsive Biomaterials: Scaffolds for Stem Cell Control. Advanced Healthcare Materials, 2021, vol. 10, №. 1, P. 2001125.

2. Lopes V., Moreira G., Bramini M., Capasso A. The potential of graphene coatings as neural interfaces. Nanoscale Horizons, 2024, vol. 9, №. 3, P. 384-406.

3. Gou S., Yang S., Cheng Y., Yang S., Liu H., Li P., Du Z. Applications of 2D nanomaterials in neural interface. International Journal of Molecular Sciences, 2024, vol. 25, №. 16, P. 8615.

4. Yusupovskaya E. A., Markov A., Kurilova U. E., Suetina I. A., Mezentseva M. V., Galiastov A., Maksimkin A., Telyshev D. V., Gerasimenko A. Yu. Flexible-Organic Semiconductor Devices for Targeted Neuron Stimulation and Cell Growth Enhancement. ACS Applied Electronic Materials, 2025, vol. 7, №. 16, P. 7640-7650.

5. Savelyev M. S., Kuksin A. V., Murashko D. T., Otsupko E. P., Suchkova V. V., Popovich K. D., Vasilevsky P. N., Vasilevskaya Yu. O., Kurilova U. E., Selishchev S. V., Pavlov A. A., Gerasimenko A. Yu. Formation of Neurointerfaces Based on Electrically Conductive Biopolymers by Two-Photon Polymerization Method. Polymers, 2025, vol. 17, №. 10, P. 1300.

6. Tishkevich D. I., Vorobjova A. I., Outkina E. A., Razanau I. U., Silibin M. V., Fedosyuk V. M., Gerasimenko A. Yu., Trukhanov A. V. Fabrication of high-density vertical CNT arrays using thin porous alumina template for biosensing applications. RSC advances, 2025, vol. 15, pp. 1375-1390.

Углеродные композиционные наноматериалы для биоинтегрированных электронных устройств

***Герасименко А.Ю.*[1,2], *Куксин А.В.*[1], *Мурашко Д.Т.*[1], *Попович К.Д.*[1,2], *Сучкова В.В.*[1,2], *Курилова У.Е.*[1,2], *Савельев М.С.*[1,2], *Шаман Ю.П.*[1]**

e-mail: gerasimenko@bms.zone

[1]*Институт биомедицинских систем, Национальный исследовательский университет «МИЭТ», Москва, Зеленоград, Россия*

[2]*Институт бионических технологий и инжиниринга, Первый Московский государственный медицинский университет им. И. М. Сеченова, Москва, Россия*

В настоящее время углеродные наноматериалы являются одним из наиболее перспективных классов функциональных структур, активно внедряемых в различные отрасли науки и техники. Среди них особое место занимают углеродные нанотрубки (УНТ) и графен благодаря их электрофизическим, механическим и оптическим свойствам, что обуславливает их широкое применение в микроэлектронике и полупроводниковой индустрии, гибкой электронике, оптоэлектронных, фотонных устройствах и сенсорных системах. Высокой актуальностью характеризуется их применение в области инновационных биомедицинских исследований. В современной практике они используются для приложений тераностики: неинвазивной визуализации патологически изменённых тканей, высокочувствительной детекции и локализации биологически активных молекул, реализации направленной доставки лекарственных препаратов, а также для создания инновационных терапевтических платформ нового поколения. Углеродные нанотрубки и графен интегрированы в конструкцию широкого спектра медицинских устройств: электрохимических биосенсоров, каркасов для тканевой инженерии и компонентов гибкой биоэлектроники. Их функциональная универсальность определяется возможностью прецизионной настройки электрофизических, оптических и механических свойств, а также управлением скоростью биорезорбции, что открывает новые перспективы в регенеративной медицине в части восстановлении структурной целостности повреждённых органов и тканей.

Для целенаправленной модуляции физических характеристик композитов на основе углеродных нанотрубок и графена разработан подход, который основывается на применении лазерного структурирования [1]. С использованием данного метода открывается возможность формирования одномерных, двумерных и трёхмерных нанотопологий моноатомных слоёв, включающих ковалентно связанные углеродные фрагменты с заданной пространственной организацией. Сформированные при лазерной обработке структуры характеризуются развитой удельной поверхностью в сочетании с высокой механической гибкостью и прочностью, а также демонстрируют регулируемые электронные свойства – от полупроводникового поведения до металлической проводимости с высокой подвижностью носителей заряда. Добавление наночастиц металлов в такие структуры также позволяет улучшить их эмиссионные свойства за счет сильных электронных взаимодействий между атомами углерода и металлов в структурах. Сформированные эмиссионные структуры обладают сниженной работой выхода, определяющей электронную эмиссию [2, 3]. Эмиссионные структуры могут использоваться для формирования интерфейсов для биоэлектроники, обеспечивающих высокоэффективный электронный транспорт между электронными устройствами и биологическими тканями при проведении электрической стимуляции и регистрации биопотенциалов.

Ключевым ограничением традиционных полимерных композитов является случайное распределение нанонаполнителей, что приводит к формированию недостаточного количества перколяционных узлов и, как следствие, к низкой электропроводности материала. Поскольку указанные преимущества углеродных нанотрубок и графена могут быть реализованы и в

объёмных трёхмерных архитектурах, интегрированных в биополимерную матрицу, электропроводность полимерных материалов может быть увеличена с применением стратегии лазерно-индуцированного формирования проводящих межсоединений с вариабельной топологией на основе УНТ и восстановленного оксида графена в объеме полимера или на гибких полимерных подложках.

Применение импульсного лазерного излучения для формирования композитных полимерных систем обеспечивает увеличение электропроводности более чем на порядок, а также позволяет осуществлять контролируемое управление морфологией пористой структуры за счёт нелинейно-оптических эффектов взаимодействия излучения с углеродными наноструктурами в полимерной среде. На основе данного подхода разработаны технологии послойной сборки электропроводящих многослойных архитектур, предназначенных для восстановления функциональной целостности биологических тканей и компенсации дефектов их проводящей матрицы.

Сформированные структуры характеризуются регулируемой пористой архитектурой и высокой устойчивостью к усталостным нагрузкам [4]. Они создают благоприятное микроокружение для адгезии и пролиферации клеток различных мягких тканей, демонстрируют высокую гемосовместимость, а также допускают прямое лазерное формирование *in situ* непосредственно в зоне дефекта биоткани. Данный подход направлен на активацию регенеративных процессов, обеспечивая восстановление структурной целостности и физиологических функций повреждённых мягких тканей.

Финансирование: Работа выполнена в рамках государственного задания Минобрнауки России (Проект FSMR-2024-0003).

Благодарности: Работа выполнена с использованием оборудования Центра коллективного пользования «Центр лазерных технологий в медицине» при поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (Соглашение № 075-15-2025-669 от 05 августа 2025 г.)

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Gerasimenko A.Y., Kuksin A.V., Shaman Y.P., Kitsyuk E.P., Fedorova Y.O., Sysa A.V., Pavlov A.A., Glukhova O.E. Electrically conductive networks from hybrids of carbon nanotubes and graphene created by laser radiation. Nanomaterials, 2021, vol. 11, №. 8, pp. 1875.

2. Gerasimenko A.Y., Kitsyuk E.P., Kuksin A.V., Ryazanov R.M., Savitskiy A.I., Savelyev M.S., Pavlov A.A. Influence of laser structuring and barium nitrate treatment on morphology and electrophysical characteristics of vertically aligned carbon nanotube arrays. Diamond and Related Materials, 2019, vol. 96, pp. 104-111.

3. Kuksin A.V., Gerasimenko A.Yu., Shaman Yu.P., Kitsyuk E.P., Sysa A.V., Eganova E.M., Slepchenkov M.M., Poliakov M.V., Pavlov A.A., Glukhova O.E. Improving the emission properties of graphene–carbon nanotube hybrid nanostructures through functionalization with BaO nanoparticles and laser treatment, Applied Surface Science, 2024, vol. 664, pp. 160222.

4. Savelyev M.S., Kuksin A.V., Gerasimenko A.Yu. Effect of Ultrasonic Treatment of Dispersed Carbon Nanocomposite Media on the Formation, Electrical Conductivity, and Degradation of a Hydrogel for Metallic Stimulation Electrodes, Gels, 2025, vol. 11, pp 1004.

Электроды на основе наноструктур из углеродных нанотрубок и графена для биомедицинских систем

***Герасименко А.Ю.*[1,2], *Куксин А.В.*[1], *Морозова А.С.*[1]**

e-mail: gerasimenko@bms.zone

[1]*Институт биомедицинских систем, Национальный исследовательский университет «МИЭТ», Москва, Зеленоград, Россия*

[2]*Институт бионических технологий и инжиниринга, Первый Московский государственный медицинский университет им. И. М. Сеченова, Москва, Россия*

Классические электродные интерфейсы на основе металлических соединений, таких как AgCl, имеют ряд существенных недостатков: необходимость использования электролитического гелевого слоя и риск появления аллергических реакций. Высокая электропроводность углеродных наноматериалов и созданных из них лазерно-индуцированных гибридных наноструктур открывает значительный потенциал для разработки гибких электронных компонентов [1,2]. Интеграция углеродных нанотрубок и графена в полимерные матрицы, такие как полидиметилсилоксан (ПДМС), позволяет создавать гибкие биомедицинские интерфейсы, например, сухие электроды [3,4].

В рамках данной работы разработаны гибкие и эластичные сухие электродные интерфейсы на основе гибридных наноструктур из углеродных наноматериалов (одностенных углеродных нанотрубок (ОУНТ) и восстановленного оксида графена(вОГ)), сформированных в матрице полидиметилсилоксана под воздействием лазерного излучения (рис. 1 а). Разработанные сухие электродные интерфейсы способны заменить традиционные электроды на основе металлических соединений при измерении электрокардиограммы (ЭКГ), электромиограммы (ЭМГ) и электроэнцефалограммы (ЭЭГ).

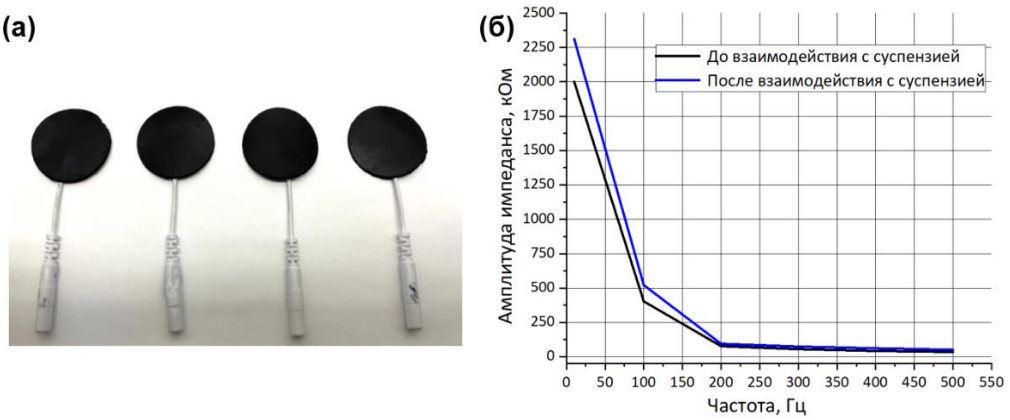


Рис. 1. Внешний вид сформированных сухих электродных интерфейсов на основе лазерно-индуцированных гибридных наноструктур из углеродных нанотрубок и графена (а), импеданс электродных интерфейсов до и после 7 дней взаимодействия со средой, имитирующей человеческий пот (б).

Структурные характеристики были исследованы методами сканирующей электронной микроскопии и спектроскопии комбинационного рассеяния. Обнаружено, что импульсное лазерное облучение с длиной волны 1064 нм и интенсивностью 15 кВт/см² изменяет морфологию поверхности композита на основе одностенных углеродных нанотрубок и восстановленного оксида графена: углеродные наноматериалы образуют электропроводящие сети, которые повышают электропроводность композита. Исследования методом спектроскопии комбинационного рассеяния выявили увеличение отношения I_D/I_G и, следовательно, образование связей между углеродными наноматериалами в местах дефектов.

Модуль упругости сформированных электродных интерфейсов составил 180±5,3 кПа, что соответствует модулю упругости человеческой кожи. Сопротивление интерфейса составило 103±7 кОм при низкой концентрации ОУНТ/вОГ 0,5/0,5 мас.%. Лазерная обработка снизила сопротивление в 13 раз до 8±2 кОм. После 7 дней взаимодействия со средой, имитирующей человеческий пот, электродные интерфейсы продемонстрировали более высокую стабильность импеданса по сравнению с традиционными электродами из Ag/AgCl (рис. 1 б). Биосовместимость интерфейсов была продемонстрирована путем изучения жизнеспособности клеток фибробластов человека на их поверхности. Согласно результатам исследования, клетки перешли в активную фазу роста с последующим заполнением поверхностей интерфейса.

Таким образом, в настоящей работе были разработаны электродные интерфейсы на основе структур ОУНТ и вОГ в матрице ПДМС. Лазерное облучение позволило сформировать связи между углеродными наноматериалами в полимерной матрице. Сформированные интерфейсы продемонстрировали более высокую стабильность импеданса по сравнению с электродами AgCl. Отсутствие гелевого слоя в сухих интерфейсах является преимуществом по сравнению с коммерческими аналогами при длительном использовании. Полученные результаты показывают, что разработанные электродные интерфейсы пригодны для использования в носимых устройствах, включая устройства для непрерывного мониторинга ЭКГ, в течение как минимум 14 дней.

Финансирование: Работа выполнена при поддержке Российского Научного Фонда (РНФ № 25-29-00938 от 26.12.2024).

Благодарности: Работа выполнена с использованием оборудования Центра коллективного пользования «Центр лазерных технологий в медицине» при поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (Соглашение № 075-15-2025-669 от 05 августа 2025 г.)

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Gerasimenko A.Y., Kuksin A.V., Shaman Y.P., Kitsyuk E.P., Fedorova Y.O., Sysa A.V., Pavlov A.A., Glukhova O.E. Electrically conductive networks from hybrids of carbon nanotubes and graphene created by laser radiation. Nanomaterials, 2021, vol. 11, №. 8, pp. 1875.

2. Kuksin A.V., Gerasimenko A.Yu., Shaman Yu.P., Kitsyuk E.P., Shamanaev A.A., Sysa A.V., Eganova E.M., Slepchenkov M.M., Poliakov M.V., Pavlov A.A., Glukhova O.E. Improving the emission properties of graphene–carbon nanotube hybrid nanostructures through functionalization with BaO nanoparticles and laser treatment. Applied Surface Science, 2024, vol. 664, pp. 160222.

3. Kuksin A.V., Morozova A.S., Vasilevskaya Y.O., Eganova E.M., Popovich K.D., Gerasimenko A.Yu. Dry electrodes based on carbon nanotubes-graphene hybrid nanostructures for long-term ECG monitoring. Diamond and Related Materials, 2025, pp. 112895.

4. Морозова А.С., Куксин А.В., Герасименко А.Ю. Перспективы разработки сухих электродов на основе углеродных наноматериалов в биомедицинской электронике. Медицинская техника, 2025, Т. 350, С. 44-48.

Цементы низкой водопотребности, модифицированные наноразмерными добавками

Гуляков Е.Г.[1], ***Хозин В.Г.***[1]

e-mail: gulyakoveg@kgasu.ru

[1]*ФГБОУ ВО «Казанский государственный архитектурно-строительный университет», Казань, Россия*

Использование наноразмерных добавок для модификации строительных материалов является перспективной областью научных исследований [1]. При этом основная сложность заключается в обеспечении равномерного распределения наночастиц в матрице из-за их склонности к агрегированию. Наиболее эффективны способы, обеспечивающие высокий уровень гомогенизации, например - совместное измельчение компонентов с нанодобавками в среде поверхностно-активных веществ.

Среди минеральных вяжущих для бетонов наиболее распространен портландцемент (ПЦ), который практически всегда применяется путем традиционного смешения с остальными компонентами. Цементы низкой водопотребности (ЦНВ), получаемые совместным помолом ПЦ (или клинкера с гипсом) с минеральными наполнителями в присутствии пластификатора, имеют преимущества в технологическом и техническом плане [2]. При помоле ЦНВ возникает адсорбционное понижение прочности (эффект Ребиндера), интенсифицирующее измельчение. Пластификатор (ПАВ) закрепляется на поверхности частиц цемента, что особенно выражено при использовании суперпластификатора (СП) на основе поликарбоксилатных эфиров: закрепленный карбоксильными группами СП дополнительно стерически отталкивает частицы, способствуя дезагрегации. Это позволяет добиться низкой водопотребности при высокой активности ЦНВ и повышает эффективность их наномодификации.

Среди ЦНВ наибольший интерес представляет ЦНВ-100 (со 100%-ым содержанием клинкера), актуальный для получения высокопрочных и сверхвысокопрочных бетонов. Известны достижения в области наномодификации цементных материалов [3]. В связи с этим модификация ЦНВ-100 наноразмерными добавками является актуальным направлением.

Целью работы являлось исследование модификации ЦНВ-100 наноразмерными добавками и определение их влияния на физико-механические свойства цементного камня (ЦК). Для этого решались задачи: анализ дисперсного состава, получение ЦНВ-100 с нанодобавками, оценка размолоспособности, нормальной густоты и прочности.

В качестве исходного цемента применялся портландцемент ЦЕМ I 42,5Н, который размалывался в вибрационно-шаровой мельнице СВМ-3 совместно с 1% СП на основе поликарбоксилатных эфиров в виде 50%-го водного раствора для получения ЦНВ-100. Для модификации применялись известные своими эффектами улучшения цементных материалов наноразмерный кремнезоль (гидрозоль диоксида кремния, сокр. «Л-30») и графеновый порошок RG-S1, состоящий из тонких и мелких нанопластин графена.

Оценка дисперсного состава ПЦ и Л-30 с помощью лазерного анализатора частиц показала, что они соответствуют заявленным характеристикам: размерность частиц ПЦ равна от 5 до 110 мкм, а Л-30 имеет размеры менее 0,1 мкм. В то время как RG-S1 в среднем обладает размерами агломератов от 3 до 23 мкм, которые практически не дезагрегировались даже с применением ультразвуковой (УЗ) обработки. Было установлено двумодальное распределение частиц по размерам базового, не модифицированного ЦНВ-100 с 1% СП, частицы которого имеют размеры от 0,1 мкм до 26 мкм при удельной поверхности порошка 7310 $см^2/г$, определенной с помощью прибора ПСХ-10А. УЗ обработка позволила разбить агрегаты частиц базового ЦНВ-100 и их распределение от 0,08 мкм до 17,5 мкм стало даже более тонкодисперсным, чем у RG-S1, что объясняется сильными связями графеновых нанопластин, не поддающихся воздействию УЗ обработки.

На основе базового ЦНВ-100 путем совместного помола с добавками были получены составы, модифицированные кремнезолем Л-30 в количестве 0,001-0,0075% от массы цемента (в пересчете на диоксид кремния) и графеновым порошком RG-S1 в количестве 0,01-0,05% от массы цемента. Оценка удельной поверхности и нормальной густоты (НГ) цементного теста показала, что введение Л-30 в состав ЦНВ-100 не влияет на данные показатели – НГ осталась равна 16%, как и у базового не модифицированного состава. В случае применения RG-S1 удельная поверхность ЦНВ-100 по мере с увеличения концентрации наномодификатора с 0,01% до 0,05% снижается на 2-25%, что так же отразилось на уменьшении НГ цементного теста – с 16% до 15,5%.

Оценка прочности ЦК, полученного из цементного теста нормальной густоты и твердеющего при нормально-влажностных условиях, приведена на рис. 1.

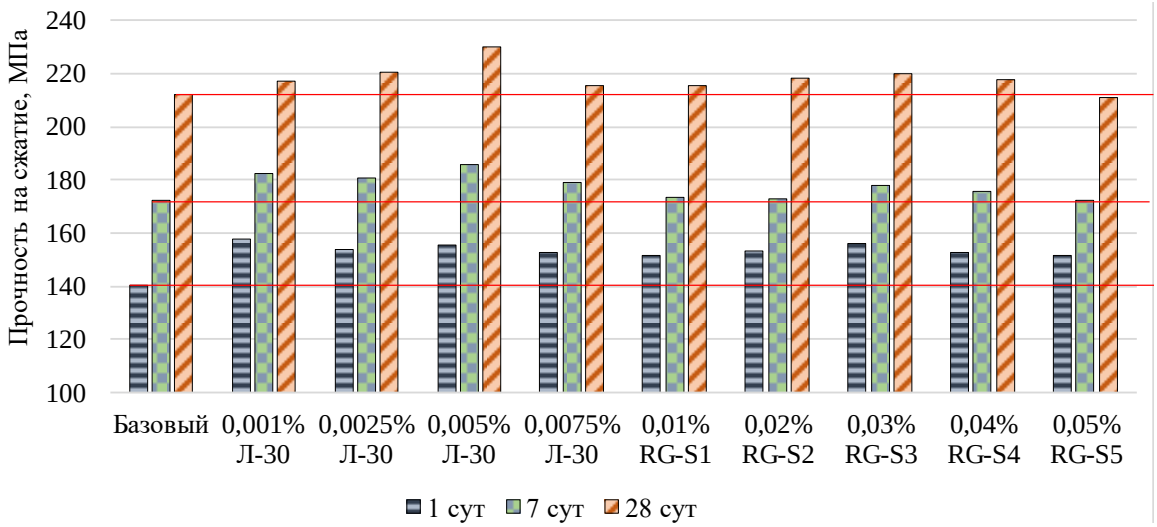


Рис. 1. Прочность на сжатие цементного камня составов ЦНВ-100

По результатам видно, что применение добавок кремнезоля и графенового порошка позволяет повысить прочность ЦК практически во все сроки твердения. Проявляются пики, при которых достигается максимальный прирост прочности – при концентрациях 0,005% Л-30 и 0,03% RG-S1. Наиболее же эффективным является добавка кремнезоля Л-30: полученный с ним ЦНВ-100 обладает прочностью ЦК, равной 230 МПа на 28 сутки, что почти на 10% выше, чем у базового состава.

Таким образом, наномодификация ЦНВ-100 повышенной дисперсности путем введения добавок кремнезоля и графенового порошка позволяет повысить прочность цементного камня, что подтверждает их эффективность и способствует получению высокопрочных вяжущих.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Брыков А. С. Модификация цементных систем добавками на основе наночастиц. История применения, текущее состояние, перспективы. Цемент и его применение, 2021, № 4, с. 56–62.

2. Токарский А. Я., Егоров В. Н., Ганзен Е. В. и др. Высокопрочный цемент и его применение при возведении монолитных железобетонных конструкций. Строительное производство, 2023, № 4, с. 60–64.

3. Соболев К. Современные достижения нанотехнологии в области цемента и бетона. Цемент и его применение, 2016, № 4, с. 66–102

Мицеллярные системы доставки этопозида с редокс-чувствительным высвобождением на основе гидрофобизированной гиалуроновой кислоты

Дредунова А.А.[1], ***Поливанова А.Г.***[1,2]

e-mail: ndredunova@mail.ru

[1]*ФГБОУ ВО «Российский химико-технологический университет имени Д.И. Менделеева», Москва, Россия*

[2]*Московский государственный технический университет им. Н.Э. Баумана, Москва, Россия*

Применение этопозида в клинической практике сопровождается рядом существенных ограничений, связанных с его низкой растворимостью в водных средах, выраженной системной токсичностью и развитием лекарственной устойчивости опухолевых клеток. Одной из стратегий решения данных проблем является включение препарата в полимерные наносистемы, способные обеспечивать его транспорт в опухолевую ткань и высвобождение в ответ на особенности внутриклеточной среды [1]. В настоящей работе для создания таких носителей использована гиалуроновая кислота (ГК), модифицированная гидрофобным олеиновым фрагментом и редокс-чувствительным дисульфидным линкером, что позволило получить амфифильные производные, способные к самосборке в мицеллы и к последующему высвобождению лекарства в восстановительных условиях опухолевой клетки.

Для получения целевых конъюгатов была выбрана низкомолекулярная гиалуроновая кислота (15 кДа). На первой стадии синтеза в цепь полимера карбодиимидным методом вводили цистаминовый фрагмент (Cst) с образованием производных ГК-Cst, на второй – свободные аминогруппы конъюгировали с олеиновой кислотой (С18), используя аналогичный подход, при различных мольных соотношениях (рис. 1) [2]. По данным ^{1}H ЯМР-спектроскопии степень замещения по цистамину составила 16,5-30,0%, по олеиновой кислоте – 7-15%, что подтвердило успешное получение серии редокс-чувствительных амфифильных производных ГК. Мицеллярная активность конъюгатов была подтверждена значениями критической концентрации мицеллообразования (ККМ), лежащими в диапазоне 0,023–0,072 мг/мл; при этом увеличение доли гидрофобного заместителя сопровождалось снижением ККМ и формированием более компактных наноструктур.

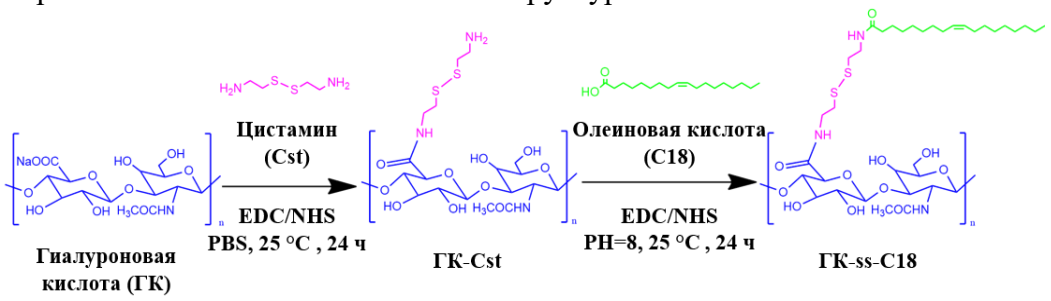


Рис. 1. Схема синтеза целевых производных гиалуроновой кислоты.

На основе синтезированных матриц были получены мицеллярные формы этопозида методом «гидратации тонкой пленки» Показано, что при стандартных условиях (10 мг ЕТО/ 100 мг матрицы, 1 ч перемешивания) значения эффективности загрузки (ЭЗ) препарата находилась в пределах 12–28%, после оптимизации параметров процесса (20 мг ЕТО/ 100 мг матрицы, 24 ч перемешивания) эффективность инкапсуляции достигла 56,21%. Полученные мицеллярные системы в физиологических средах имели размеры порядка 160–230 нм; их величина зависела как от состава полимерной матрицы, так и от ионной силы среды. Дзета-потенциал частиц изменялся в широких пределах (значения от -55,6 до -6,72мВ), однако для большинства образцов был достигнут уровень, достаточный для сохранения коллоидной устойчивости системы.

Высвобождение этопозида исследовали в условиях, моделирующих физиологическую (PBS, pH=7,4) и опухолевую среды (рис. 2). Показано, что в отсутствие глутатиона (GSH) мицеллярные системы демонстрируют относительную стабильность и удерживают препарат, тогда как в присутствии 10 мМ GSH наблюдается ускорение высвобождения этопозида, что указывает на наличие редокс-отклика. Вместе с тем скорость разрушения носителя и полнота выхода препарата пока остаются недостаточными и требуют дальнейшей оптимизации степени гидрофобизации матрицы и условий загрузки лекарственного вещества. Дополнительным резервом повышения эффективности может стать использование более липофильной пролекарственной формы этопозида и изменение параметров инкубации при формировании наносистем.

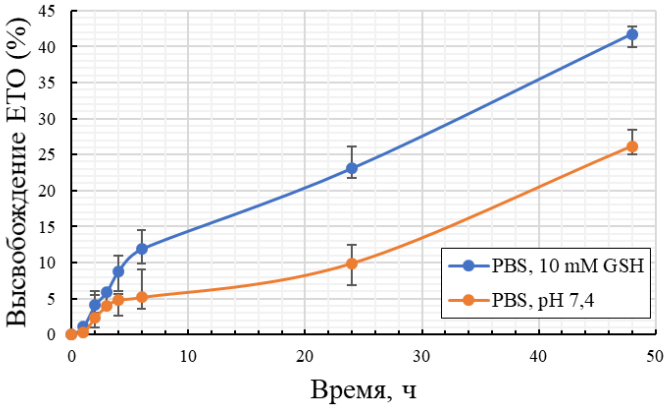


Рис. 2. Высвобождения этопозида из мицеллярной системы ГК-ss-С18 с ЭЗ=56,21%.

Таким образом, в работе получены редокс-чувствительные производные гиалуроновой кислоты, способные формировать мицеллярные системы доставки этопозида. Установлено, что структура полимерной матрицы и степень ее гидрофобизации существенно влияют на мицеллообразование, размер частиц, эффективность загрузки и характер высвобождения препарата. Разработанные системы представляют интерес как основа для дальнейшего создания адресных наноносителей с контролируемым высвобождением противоопухолевых соединений.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Fathi-karkan S., et al. Recent advancements in the targeted delivery of etoposide nanomedicine for cancer therapy: A comprehensive review. Eur J Med Chem., 2023, vol. 259, P. 115676.

2. Karimi-Soflou R., Karkhaneh A. Redox-Sensitive multifunctional hyaluronic acid-based nanomicelles with fine-controlled anticancer drug release. Int. J. Pharm., 2022, vol. 629, P. 122402.

Моделирование спиновой проводимости хиральных нанотрубок и проводов

***Дьячков П.Н.*[1]**

e-mail: p_dyachkov@rambler.ru
Институт общей и неорганической химии им. Н.С. Курнакова РАН, Москва, Россия

Хиральность связана с отсутствием у соединения инверсионной симметрии, и хиральные материалы обладают некоторыми спиновыми свойствами, которых нет у нехиральных аналогов. К ним относится спиновая селективность проводимости и образование хиральных спиновых токов. Спинтроника на основе хиральных материалов в настоящее время быстро развивается, что делает актуальным изучение спиновых свойств нанотрубок, обладающих широким спектром хиральных структур.

Для изучения влияния хиральности и спина на зонную структуру нанотрубок мы применяем релятивистский метод цилиндрических волн, в котором учитываем винтовую симметрию нанотрубок, и возможны расчеты любой хиральной трубки. Конечно, одних только расчетов спин-зависимой зонной структуры недостаточно для предсказания спиновой проводимости и селективности, требуются дополнительные соображения. Мы полагаем, что спиновые токи $I_\alpha \sim c_\alpha\tau_\alpha$ и $I_\beta \sim c_\beta\tau_\beta$ для электронов со спинами α и β пропорциональны концентрациям c_α и c_β подвижных электронов с данным спином в материале и вероятностям τ_α и τ_β туннелирования электронов сквозь образованный трубкой хиральный потенциальный барьер. Для оценки характеристик c_α и c_β принимается, что в переносе спинов принимают участие электроны только граничных спиновых состояний, расположенных на краях валентной зоны и зоны проводимости наноматериала. Кроме того, из моделей туннелирования известно, что вероятность туннелирования ($\tau_{\uparrow\uparrow}$) больше при параллельной ориентации спина электрона и вектора хиральности *S* по сравнению со случаем их антипараллельной ориентации ($\tau_{\uparrow\downarrow}$). С помощью такого подхода мы исследовали многочисленные хиральные углеродные, кремниевые, золотые, BN, SiC, GaAs и другие нанотрубки и нанопровода.

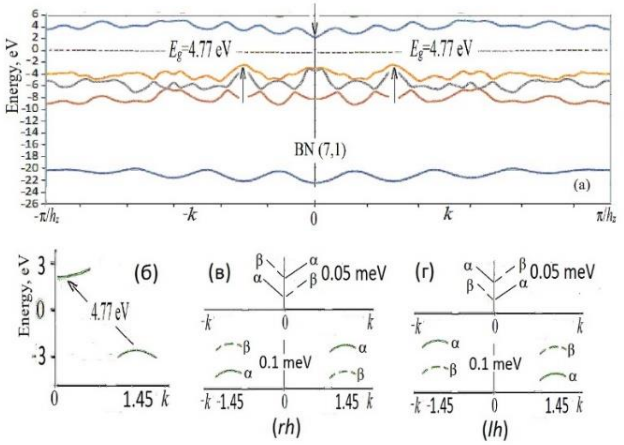


Рис. 1. Электронная структура хиральной BN (7, 1) нанотрубки.

Проиллюстрируем некоторые особенности развиваемого подхода на примере хиральных BN (7, 1) и (7, 3) трубок. На рис. 1а показан общий вид электронных дисперсионных кривых (7, 1) трубки для положительных и отрицательных значений волнового вектора *k*. В масштабе этого рисунка спин-орбитальные расщепления уровней неразличимы, дисперсионные кривые выглядят одинаково для правовинтовой (*rh*) и левовинтовой (*lh*) форм соединения, и энергии электронов не меняются при изменении знака волнового вектора, $E_{\lambda 0}(-k) = E_{\lambda 0}(k)$. Зонная структура на рис. 1а имеет вид четырех дважды заполненных дисперсионных кривых валентной зоны, отделенной щелью $E_g = 4.77$ эВ от состояний зоны проводимости. Положения краев зон обозначены стрелками. Минимальная оптическая щель соответствуют переходу

между потолком валентной зоны, расположенном вблизи двух точек $k = \pm 1.45$ ат.ед.$^{-1}$, и минимумом зоны проводимости в центре зоны Бриллюэна $k = 0$ (рис. 1б). Рис. 1в в увеличенном масштабе демонстрирует эффекты спин-орбитального расщепления краев зон для правовинтовой (*rh*) трубки. Прежде всего заметим, что электроны минимума зоны проводимости должны обладать крайне низкой подвижностью, поскольку они расположены при значении волнового вектора $k = 0$, где векторы импульса $p = \hbar k$ и скорости электронов $v = p/m_e$ нулевые; состояния минимума зоны проводимости не принимают участия в формировании спиновых токов, а потому и спиновой селективности проводимости.

Иная ситуация возникает для потолка валентной зоны. В точке максимума при $k = 1.45$ ат.ед.$^{-1}$ верхний уровень соответствует α, а нижний β состоянию, и потому $c_\alpha > c_\beta$. Положительное значение квазиимпульса k соответствует транспорту электронов в направлении оси z правовинтовой нанотрубки. Спин α электронов ориентирован в этом же направлении и реализуется случай $I_\alpha \sim c_\alpha \tau_{\uparrow\uparrow}$, а для β электронов со спинами в направлении против оси хиральности, $I_\beta \sim c_\beta \tau_{\uparrow\downarrow}$. Поскольку $c_\alpha > c_\beta$ и $\tau_{\uparrow\uparrow} > \tau_{\uparrow\downarrow}$, для направления $z > 0$ правовинтовой нанотрубки $I_\alpha > I_\beta$, то есть электронные уровни точки $k = 1.45$ ат.ед.$^{-1}$ благоприятствуют преимущественному транспорту α электронов вдоль этой оси.

Поскольку изменение знака волнового вектора k вызывает переворот спина $E_{\lambda\beta}(-k) = E_{\lambda\alpha}(k)$, $E_{\lambda\alpha}(-k) = E_{\lambda\beta}(k)$, в точке $k = -1.45$ ат.ед.$^{-1}$ край валентной зоны образован уже электронами с β спином, и $c_\beta > c_\alpha$. Ориентация β спина в направлении –z повышает и вероятность туннелирования β электронов против винтовой оси. Таким образом, в правовинтовой (7, 1) нанотрубке доминирует перенос α электронов в направлении оси хиральности и β электронов против этой оси. Если, например, к концам такой нанотрубки приложить переменное напряжение, можно получить противоположно направленные спиновые токи, то есть токи без суммарного переноса электронного заряда.

Диаграммы, представленные на рис. 1в для правовинтовой нанотрубки (7, 1) BN, легко трансформируются в зонную структуру этой же трубки, но с левовинтовой (*lh*) хиральностью (рис. 1г). Для этого достаточно изменить направления спинов α и β на дисперсионных кривых: $E_\alpha(k)|_{lh} = E_\beta(k)|_{rh}$, $E_\beta(k)|_{lh} = E_\alpha(k)|_{rh}$. В частности, в левовинтовой трубке при $k = 1.45$ ат.ед.$^{-1}$ верхний уровень валентной зоны соответствуют состояниям с β, а не с α спинами, что должно обеспечить более высокую концентрацию подвижных β-электронов ($c_\beta > c_\alpha$) для транспорта в положительном направлении оси z. Векторы β спина и хиральности параллельны, они ориентированы в направлении $z < 0$, и в этом случае $\tau_\beta > \tau_\alpha$, что обеспечивает в левовинтовой трубке преимущественный транспорт β-электронов в направлении $z > 0$ и α-электронов в направлении $z < 0$. Таким образом, выбирая нанотрубку (7, 1) BN требуемой хиральности, можно получить преимущественный транспорт электронов с разными спинами в противоположных направлениях за счет эффектов связанной с хиральностью спиновой селективности.

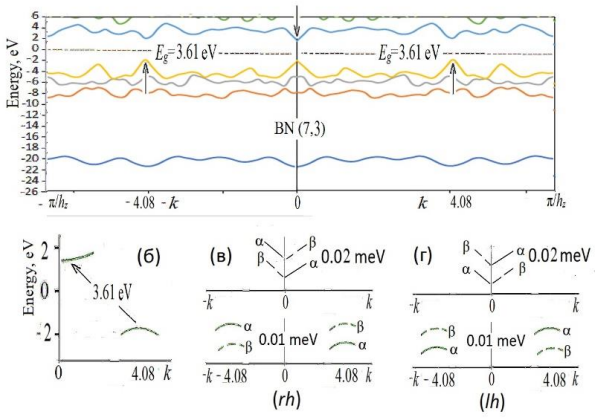


Рис. 2. Зонная структура хиральной BN (7, 3) нанотрубки

В нанотрубке (7, 3) (рис. 2) минимум зоны проводимости расположен при $k = 0$, а потому, как и трубке (7, 1), электроны дна зоны проводимости не активны в электронном и спиновом

транспорте. В отличие от трубки (7, 1), на максимуме валентной зоны правовинтовой нанотрубки (7, 3) при положительном значении вектора k β электроны расположены выше, чем α электроны, а поэтому $c_\beta > c_\alpha$, то есть концентрация мобильных β электронов выше, чем α. С другой стороны, низкая вероятность туннелирования $\tau_{\uparrow\downarrow}$ должна ограничивать поток электронов $I_\beta \sim c_\beta \tau_{\uparrow\downarrow}$ с β спинами, которые направлены против оси хиральности правовинтовой (7, 3) трубки. Транспорт α электронов $I_\alpha \sim c_\alpha \tau_{\uparrow\uparrow}$ лимитируется малостью c_α. Таким образом, в нанотрубке BN (7, 3) эффекты спиновой селективности проводимости, если и могут наблюдаться, то они должны быть слабее, чем в BN (7, 1).

Работа выполнена в рамках государственного задания ИОНХ РАН.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. D’yachkov P. N. Quantum chemistry of nanotubes: Electronic cylindrical waves. CRC P ress, London: Taylor and Francis, 2019. 212 p.

2. D’yachkov P. N., D’yachkov E. P. Ab initio calculations of spin splitting and transport i n the binary chiral SiC and BN nanotubes. J. Phys. Chem. C, 2025, vol. 129, № 3, p. 1850.

3. D’yachkov P. Charge-to-spin conversion in chiral monoatomic Te chains investigated us ing relativistic cylindrical waves technique. J. Chem. Phys., 2025, vol. 163, p. 184705.

4. D’yachkov P. Chirality-dependent spin states and transport in GaAs nanotubes: Cylindri cal wave technique calculations. Phys. Rev. B, 2025, vol. 112, p. 125125.

«Умный» герметик с углеродными нанотрубками, меняющий электросопротивление при нарушении целостности шва (датчик разгерметизации)

Жаилканов А.С. [1]***, Протопопова Ю.Д.*** [1]
e-mail: rusak.yui@gmail.com
[1]*Филиал ФГБОУ ВО «Уфимский университет науки и технологий» в г.Кумертау, 453300, г. Кумертау, Российская Федерация*

Материаловедение активно развивает направление функциональных композитов – «умных» материалов, способных совмещать защитные функции с функциями сенсорики. Одним из перспективных направлений является создание «умного» герметика – композита на основе полимерной матрицы и углеродных нанотрубок (УНТ), который может изменять электрическое сопротивление при нарушении целостности шва, выступая в роли встроенного датчика разгерметизации. Это открывает возможности для непрерывного мониторинга состояния конструкций в авиации, строительстве и машиностроении.

Ключевыми барьерами при создании таких материалов являются агломерация УНТ из-за высокой поверхностной энергии и слабая адгезия на границе «наполнитель-матрица». Различие коэффициентов упругости фаз приводит к возникновению сдвиговых напряжений при деформации, вызывающих отслоение трубок и нестабильность сенсорного отклика. Превышение оптимальной концентрации наполнителя ведет к неконтролируемой агломерации и ухудшению механических свойств.

В работе представлен анализ современных методов создания электропроводящих полимерных композитов по четырем ключевым направлениям:

1.Исследование функциональной активности УНТ. Чеченин и др. [1] показали, что активность МУНТ в композите падает обратно пропорционально числу слоев. Оптимальная концентрация для достижения максимальной ударной вязкости составляет около 7-9%, что согласуется с теоретической моделью.

2.Влияние типа углеродного наполнителя. Соловьянчик и др. [2] установили, что введение 1% УНТ в полиамидный композит с углеродным волокном позволяет придать материалу стабильные электропроводящие свойства с сопротивлением до $5{,}8 \cdot 10^3$ Ом, регулируя при этом механические характеристики.

3.Перколяционный переход. Рогачев и Каленчук [3] выявили, что порог перколяции в системе «полиэтилен + технический углерод» наступает при 25 мас.%, что сопровождается падением удельного сопротивления на восемь порядков. Меньшие концентрации (5–20 мас.%) повышают жесткость материала, но не придают электропроводности.

4.Роль межфазных взаимодействий. Сидорова и др. [5] доказали, что аппретирование поверхности углеродных волокон нивелирует влияние дефектов и доминирующим образом влияет на смачиваемость и адгезию. Элбакян и Запороцкова [4] теоретически подтвердили, что взаимодействие УНТ с полимером происходит как за счет ван-дер-ваальсовых сил, так и кулоновских взаимодействий, что критически важно для стабильности сенсорного отклика.

Технологические вызовы и выводы. Несмотря на доказанную эффективность, исследователи сталкиваются с серьезными проблемами: агломерация наночастиц при высоких концентрациях, слабая адгезия на границе раздела фаз, разобщенность исследований, отсутствие работ, связывающих функционализацию наполнителя с прямыми измерениями сенсорного отклика. Сделан вывод о необходимости проведения комплексных исследований,

направленных на решение проблем агрегации и улучшения адгезии, а также на разработку математических моделей, описывающих зависимость электросопротивления от деформации.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Мясоедова Т. Н., Недоедкова О. В., Яловега Г. Э. Электрофизические свойства композитных материалов на основе оксида графена и полианилина. Конденсированные среды и межфазные границы, 2024, т. 26, № 1, с. 104–110.
2. Рогачев Е. А., Каленчук А. А. Разработка электропроводного полимерного композита на основе линейного полиэтилена низкой плотности, модифицированного высокоструктурным техническим углеродом. Омский научный вестник. Серия: Авиационно-ракетное и энергетическое машиностроение, 2024, т. 8, № 3, с. 128–134
3. Сидорова Е. В., Стариченко Н. С., Карпов А. П., Федюшкина А. Г., Бехелева Ю. В., Ельчанинова В. А. Исследование смачиваемости углеродных стержней на основе волокна УКН/5000. Известия высших учебных заведений. Химия и химическая технология, 2025, т. 68, вып. 9, с. 20–27.
4. Соловьянчик Л. В., Минаева Л. А., Гуров Д. А. Влияние типа углеродного наполнителя на физико-механические и электропроводящие свойства литьевых термопластичных материалов на основе полиамида. Труды ВИАМ, 2024, № 1 (131), ст. 04.
5. Чеченин Н. Г., Кобзев В. А., Авторин С. С., Воробьёва Е. А., Макунин А. В. Некоторые особенности функциональной активности многослойных углеродных нанотрубок в полимерных нанокомпозитах. Вестник Московского университета. Серия 3: Физика. Астрономия, 2025, № 4, с. 1–6.
6. Элбакян Л. С., Запороцкова И. В. Исследование проводящих свойств композитных полимерных материалов на основе поливинилпирролидона, допированных одно- и двухслойными нанотрубками. Известия Саратовского университета. Новая серия. Серия: Физика, 2025, т. 25, вып. 4, с. 495–504..

Деградация проводимости наноструктурированного анатаза: автомодельный характер кинетики обеднения ансамблей подвижных носителей заряда

***Зимняков Д.А.*[1], *Алонова М.В.*[1], *Кочкуров Л.А.*[1], *Славнецков И.О.*[1]**

e-mail: zimnykov@mail.ru
[1]*ФБГОУ ВО «Саратовский государственный технический университет имени Гагарина Ю.А.», Саратов, Россия*

Неупорядоченные наноструктуры на основе полупроводниковых частиц являются одной из перспективных материальных платформ для хеморезистивных сенсоров [1]. Это обусловлено высокой чувствительностью проводимости низкоразмерных слоев подобных материалов к химическому составу окружающей среды. Наряду с достоинствами, подобные хеморезистивные сенсоры обладают таким недостатком, как деградация чувствительности в процессе работы. Это обусловлено обеднением ансамблей подвижных носителей вследствие захвата ловушками в наноструктурированных полупроводниках. На практике для увеличения стабильности функциональных характеристик и частичного подавления эффекта локализации подвижных носителей на ловушках используется подогрев сенсорных элементов терморезистивными нагревателями до температур около (300 – 400)°C [2].

Целью работы явилось исследование кинетики деградации проводимости низкоразмерных слоев наноструктурированного диоксида титана (анатаза) при длительном переносе подвижных зарядов под действием электрического поля. Наноструктурированный анатаз как широкозонный ($E_g \approx$ 3,2 эВ) полупроводник n типа часто применяется как чувствительный элемент в прототипах хеморезистивных сенсоров [3]. Особенностью наночастиц анатаза является большое среднее число ловушек (поверхностных дефектов и кислородных вакансий), приходящихся на одну наночастицу, которое сопоставимо со средним числом электронов проводимости в частице. Исследование деградации проводимости в наноструктурированном анатазе представляет интерес не только для решения прикладных задач сенсорики, но и с точки зрения уточнения представлений об особенностях переноса зарядов в нано-дисперсных полупроводниках вблизи порога перколяции.

Исследуемые слои наночастиц анатаза (исходный материал - нанопорошок № 637254 от компании Sigma Aldrich (США) с размерами частиц не более 25 нм) формировались осаждением из водных суспензий с различными массовыми долями частиц на кварцевые подложки со встречно-штыревыми электродными системами с последующим испарением жидкой фазы. Электродные системы состояли из 19 пар платиновых электродов толщиной ≈ 1 мкм и межэлектродным зазором ≈ 45 мкм, ширина электродов составляла ≈ 100 мкм. В зависимости от массовой доли частиц в суспензиях, начальные значения интегральной проводимости $G(0)$ образцов находились в интервале от $\approx 4\times10^{-10}$ См до 1×10^{-9} См. Измерения текущих значений $G(t)$ осуществлялись при температуре 22° С и влажности 40 % в двух режимах: путем регистрации напряжения $U(t)$ на образцах при постоянном токе $I = 1$ нА; путем регистрации тока $I(t)$ через образцы при постоянном падении напряжения 5В. В первом случае ток через образцы обеспечивался генератором постоянного тока SRS CS-580 (Stanford Research Systems, США), а падение напряжения измерялось мультиметром Agilent 34401A. Во втором случае использовался тераомметр Тетрон М13 (Россия). Регистрация данных осуществлялась на ПК с частотой выборки 20 $с^{-1}$. В качестве примера на рис. 1, а приведены зависимости $U(t)$ (режим 1) для 3 образцов с различными значениями $G(0)$.

Для интерпретации полученных данных была разработана ab initio феноменологическая модель, описывающая эволюцию концентрации электронов проводимости и средней длины пробега l^* до захвата ловушками. Решение кинетического уравнения для концентрации носителей при $I = const$ сводится к безразмерному выражению $\tilde{n}(\zeta) = (1-\zeta)^{1.5}$, где $\tilde{n}$ –

нормированная на начальное значение текущая концентрация носителей, ζ – безразмерное время, равное t/τ_d, τ_d – характерное время обеднения, определяемое I, начальной концентрацией носителей и эффективным сечением структуры.

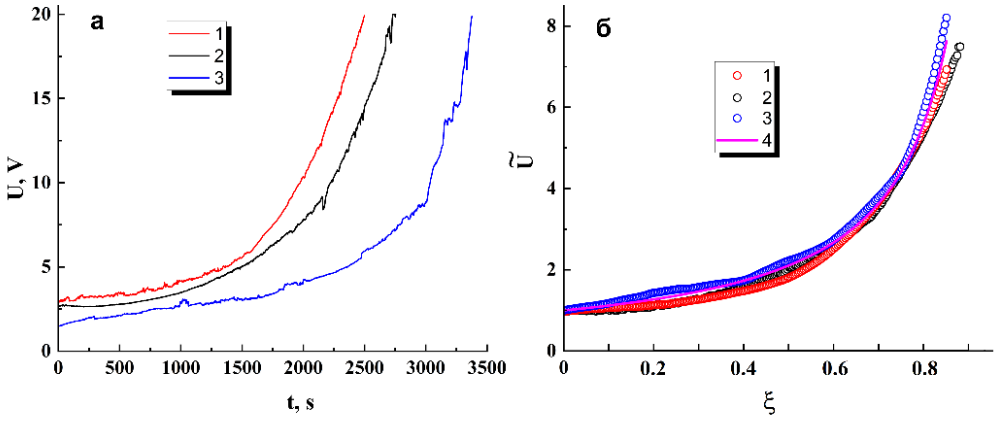


Рис. 1. Типичные зависимости $U(t)$ для обедняемых слоев наноструктурированного анатаза; значения $G(0)$: 1 - ≈ 3.2×10^{-10} См, 1 - ≈ 3.8×10^{-10} См, 1 - ≈ 7.1×10^{-10} См (а); перемасштабированные зависимости (1-3, рис. 1, а), иллюстрирующие автомодельность обеднения ансамблей носителей в наноструктурированном анатазе; 4 – теоретическая зависимость при $\alpha \approx 0.72$ (б).

Предполагая степенную зависимость дрейфовой скорости носителей от $U(t)$: $v_d \propto [U(t)]^{\alpha}$, можно установить взаимосвязь между $\tilde{n}$ и нормированным падением напряжения $\tilde{U} = U(t)/U(0)$ (рис. 1, б). Для исследуемых образцов получено $\alpha \approx 0.72$.

При $U = const$ автомодельное решение кинетического уравнения для $\tilde{n}$ имеет вид: $\tilde{n}(\zeta) = (1+\zeta)^{-3}$, а τ_d отличается от аналогичной величины в режиме с $I = const$. Особенностью процесса обеднения вне зависимости от режимов является значение l^*, превышающее не только среднее расстояние между частицами в структуре, но и межэлектродное расстояние. На наш вгляд, полученные результаты представляют интерес с точки зрения уточнения представлений о фундаментальных свойствах транспорта зарядов в неупорядоченных наноструктурированных полупрводниках.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Rohilla D., Chaudhary S., and Umar A. An overview of advanced nanomaterials for sensor applications. Engineered Science, 2021, vol. 16, pp. 47–70.

2. Fedorov F., Vasilkov M., Lashkov A., Varezhnikov A., Fuchs D., Kübel C., Bruns M., Sommer M., Sysoev V. Toward new gas-analytical multisensor chips based on titanium oxide nanotube array. Scientific Reports, 2017, art. no. 9732.

3. Zimnyakov D.A., Volchkov S.S., Vasilkov M.Yu., Plugin I.A., Varezhnikov A.S., Gorshkov N.V., Ushakov A.V., Tokarev A.S., Tsypin D.V., Vereshagin D.A. Semiconductor-to-insulator transition in inter-electrode bridge-like ensembles of anatase nanoparticles under a long-term action of the direct current. Nanomaterials, 2023, vol. 13, art. no. 1490.

Влияние железа на структуру и свойства металлоуглеродных нанокомпозитов на основе цеолитоподобных каркасов ZIF-67

Зорин А.В.[1]

e-mail: m1602075@edu.misis.ru
[1]НИТУ МИСИС, Москва, Россия

Металлорганические каркасы (МОК) на основе цеолитных имидазолатов (ZIF), в частности ZIF-67, являются перспективными прекурсорами для получения металлоуглеродных нанокомпозитов — электродных материалов суперконденсаторов [1]. Биметаллические системы Co-Fe-ZIF позволяют варьировать фазовый состав, морфологию и электрохимические свойства производных нанокомпозитов за счёт активации дополнительных редокс-процессов Fe^{2+}/Fe^{3+} и каталитического влияния железа на графитизацию углеродной матрицы [2]. Однако систематические данные о влиянии соотношения Co:Fe в исходном МОК на структуру и ёмкостные характеристики производных материалов в литературе отсутствуют. **Целью настоящей работы** является исследование влияния Fe-замещения в ZIF-67 на структуру, морфологию и электрохимические свойства металлоуглеродных нанокомпозитов Co-Fe/C, полученных пиролизом, для оптимизации ёмкостных характеристик электродных материалов суперконденсаторов.

Fe-замещённые МОК со структурой ZIF-67 (Co:Fe = 100:0–50:50) синтезировали методом химического осаждения из водного раствора ($Co(NO_3)_2 \cdot 6H_2O$, $Fe(NO_3)_3 \cdot 9H_2O$, 2-метилимидазол; мольное соотношение 2-MeIM/H_2O/нитраты = 8/223/1) при ультразвуковом воздействии и комнатной температуре без применения автоклава [3]. Металлоуглеродные нанокомпозиты Co-Fe/C получали ИК-пиролизом в атмосфере N_2 при 600 °C (скорость нагрева 50 °C/мин, выдержка 5 мин). Структуру исследовали методами РФА (Дифрей-401, Cr-Kα-излучение), СЭМ/ЭДС (MIRA3-LMH, Tescan, 20 кВ). Электрохимические характеристики измеряли в симметричной двухэлектродной ячейке в 2 М KOH.

РФА синтезированных МОК подтвердил формирование кристаллической структуры ZIF-67 при содержании железа до 20 масс.%. Увеличение концентрации Fe до 30 масс.% сопровождается снижением интенсивности характерных рефлексов и разупорядочением структуры каркаса. Средний размер ОКР закономерно уменьшается с 36 до 25 нм с ростом содержания Fe вследствие различия ионных радиусов Co^{2+} (0,74 Å) и Fe^{2+}/Fe^{3+} (0,76/0,64 Å) и генерации локальных структурных дефектов. СЭМ-исследования подтвердили сохранение полиэдрической морфологии кристаллов (1–3 мкм) при содержании Fe до 20%, с последующим нарушением формы и появлением слоистых структур при 30%.

Пиролиз при 600 °C приводит к формированию нанокомпозитов Co-Fe/C, содержащих наночастицы ГЦК-Co и ОЦК-CoFe, равномерно диспергированные в азот-допированной пористой углеродной матрице. С ростом содержания Fe доля сплавной фазы ОЦК-CoFe возрастает до 60% при Co:Fe = 70:30, а средний размер металлических наночастиц увеличивается с 6 до 22 нм. Установлено каталитическое влияние железа на графитизацию углеродной матрицы при 600 °C: пик (002) графита при $2\theta \approx 44{,}5°$ (CrKα) сужается и усиливается с ростом содержания Fe. Морфология пиролизованных образцов эволюционирует от компактных агломератов (1–3 мкм) для состава 95:5 до развитой пористой структуры губчатого типа с порами 200–800 нм для состава 70:30, что обусловлено различными скоростями восстановления Co и Fe.

Электрохимические испытания методами ЦВА и гальваностатического заряда-разряда выявили определяющую роль соотношения Co:Fe в формировании механизмов накопления заряда. Введение железа обуславливает переход от ёмкостного поведения (ДЭС) к псевдоёмкостному с активацией обратимых редокс-процессов $Fe^{2+} \leftrightarrow Fe^{3+}$ и $Co^{2+} \leftrightarrow Co^{3+}$ в диапазоне потенциалов 0,2–0,6 В. Оптимальный состав Co:Fe = 90:10 обеспечивает

максимальную удельную ёмкость 187 Ф/г при 0,25 А/г, сохранение 88% ёмкости при 2 А/г и циклическую стабильность 82% после 5000 циклов. Состав Co:Fe = 70:30 достигает 165 Ф/г при низких токах за счёт более выраженного псевдоёмкостного вклада, однако при высоких плотностях тока демонстрирует усиление диффузионных ограничений. При соотношении Co:Fe = 50:50 наблюдается резкое ухудшение характеристик вследствие агрегации наночастиц и перекрытия пористой структуры.

Таким образом, установлен выраженный синергетический эффект между кобальтом и железом в нанокомпозитах Co-Fe/C, проявляющийся в формировании сплавной фазы ОЦК-CoFe, каталитическом ускорении графитизации углеродной матрицы, расширении потенциального окна редокс-процессов и развитии иерархической пористости. Составы с Co:Fe = 90:10 и 80:20 обеспечивают оптимальный баланс между высокой псевдоёмкостью и благоприятными кинетическими характеристиками, что подтверждает перспективность биметаллических Co-Fe/C нанокомпозитов на основе Fe-замещённых ZIF-67 в качестве электродных материалов для суперконденсаторов.x

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Qiu P. F. et al. Recent progress in bimetallic-organic framework materials and their derivatives for supercapacitors. CrystEngComm, 2024, vol. 26, pp. 4935–4952.

2. Gao S. et al. Three-dimensional porous carbon-supported Co/Fe bimetallic nanoparticles derived from carboxymethyl cellulose for enhanced supercapacitor electrodes. Journal of Alloys and Compounds, 2024, vol. 1003, p. 175747.

3. Muratov D. G. et al. Electrochemical properties of CoMn/C based on zeolite-like metal-organic frameworks. Modern Electronic Materials, 2025, vol. 11, pp. 163–174.

Диагностика проводящего дефекта в фотонно-кристаллической структуре с помощью циркулярно-поляризованной электромагнитной волны

***Иванов П.С.*[1], *Яцышен В.В.*[1]**

e-mail: ivanov500r@mail.ru
[1]*ФГАОУ ВО «Волгоградский государственный университет», Волгоград, Россия*

В данной работе проведён расчёт и сравнение эллипсометрических параметров для двух фотонно-кристаллических структур, одна из которых идеальная (без дефектов), другая – с проводящим дефектом на месте 10-го слоя (диэлектрическая проницаемость дефектного слоя $\varepsilon_d = 5 + 1{,}5i$).

В данном случае фотонно-кристаллическая структура представляет собой периодическую систему, состоящую из 10 пар слоёв.

Параметры одной пары представлены в Таблице 1.

Таблица 1. Параметры одной пары слоёв фотонно-кристаллической структуры.

№ слоя	**ε (диэлектрическая проницаемость)**	**d (толщина), нм**
1	6,25	64,1
2	1,5625	128,2

Длина волны падающего излучения λ = 640 нм.

Параметры отражательной эллипсометрии [1] определяются следующим образом:

$$\dot{\rho} = \frac{R_p}{R_s},$$

где R_p и R_s – амплитудные коэффициенты отражения для s- и p-поляризаций.

Параметр $\dot{\rho}$ представим в виде:

$$\dot{\rho} = \rho_0 e^{i\Delta},$$

где ρ_0 – модуль эллипсометрического параметра; Δ – эллипсометрический угол. Часто ρ_0 представляют в виде:

$$\rho_0 = tg\Psi$$

где Ψ – второй эллипсометрический угол.

В работе использовался метод отражённой эллипсометрии [1-3].

На рисунках 1 и 2 представлены результаты расчетов для фотонно-кристаллических структур.

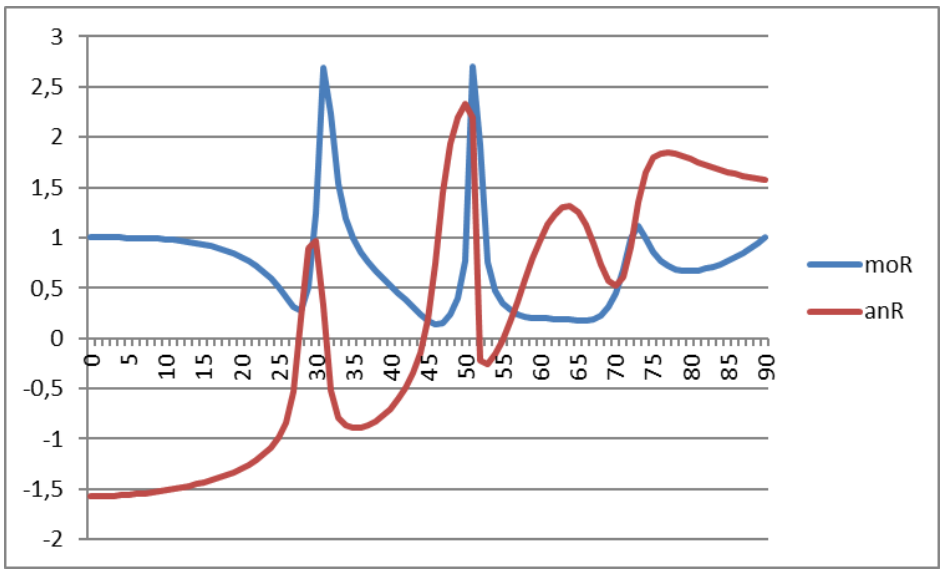


Рис. 1. Угловые спектры эллипсометрических параметров отраженной электромагнитной волны для идеальной фотонно-кристаллической структуры.

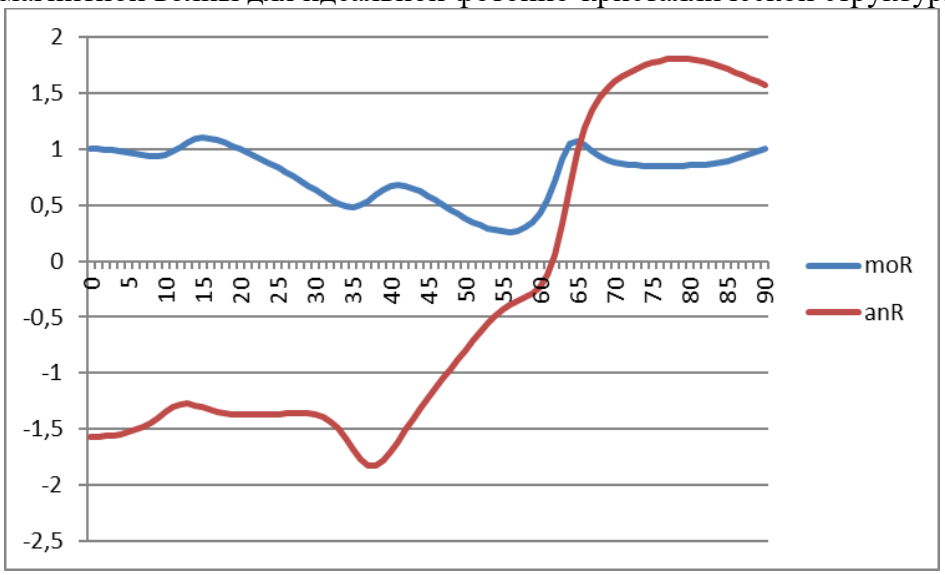


Рис. 2. Угловые спектры эллипсометрических параметров отраженной электромагнитной волны для фотонно-кристаллической структуры с проводящим дефектом.

Сравнивая рисунки 1 и 2 видим, что наличие дефекта существенно изменяет угловые спектры эллипсометрических параметров отраженной электромагнитной волны, что показывает высокую чувствительность эллипсометрического метода для изучения дефектов в фотонно-кристаллических структурах.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Yatsishen V. V. Ellipsometry of thin films of biological objects under conditions of total internal reflection. Physics of Wave Processes and Radio Systems, 2021, vol. 24, № 4, pp. 7–12.

2. Bibikova E., Al-Wassiti N., Kundikova N. New ellipsometric approach for determining small light ellipticities. Optics and Lasers in Engineering, 2019, vol. 116, pp. 1–5.

3. Maan A., Tyagi A., Prasad V. Field-free molecular orientation by delayed elliptically polarized laser pulses. Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy, 2018, vol. 188, pp. 268–275.

Получение гибридных материалов на основе магнитных наночастиц и восстановленного оксида графена

Иони Ю.В.[1,2], ***Ибрагимова В.Р.***[1], ***Сапков И.В.***[1,3], ***Амосов А.Г.***[1]

e-mail: Acidladj@mail.ru
[1]*Институт общей и неорганической химии им. Н.С. Курнакова РАН, Москва, Россия*
[2]*МИРЭА – Российский технологический университет, Москва, Россия*
[3]*Физический факультет Московского Государственного Университета им. М.В.Ломоносова, Москва, Россия*

Гибридные материалы на основе восстановленного оксида графена (ВОГ) и магнитных наночастиц (НЧ) представляют интерес для гибкой электроники, тензодатчиков, сенсоров и магнито-управляемых систем. ВОГ сочетает высокую электропроводность, механическую прочность и наличие остаточных функциональных групп, что делает его удобной матрицей для закрепления НЧ оксидов и металлов переходных элементов. Введение НЧ Fe3O4 и Ni в структуру ВОГ позволяет совместить в плёночном материале проводимость и магнитный отклик, что существенно расширяет область применения полученных гибридов [1, 2].

В исследовании описан новый подход к получению гибридных плёнок ВОГ с двумя типами магнитных наночастиц: магнетитом Fe_3O_4 и никель-содержащими НЧ. Для системы Fe_3O_4 /ВОГ оксид графена синтезировали по модифицированному методу Хаммерса, НЧ магнетита получали методом соосаждения, после чего формировали композитную плёнку Fe_3O_4/ОГ с последующей обработкой в сверхкритическом изопропаноле (СКИ) при 280 °C. Таким образом при повышенных давлении и температуре проходило восстановление ОГ до ВОГ с сохранением НЧ на графеновой поверхности. Для никельсодержащих гибридов использовали плёнки ОГ, пропитанные солями Ni(II) ($Ni(form)_2$, $Ni(acac)_2$, $NiCl_2$); при обработке в СКИ происходила одновременное восстановление ОГ до ВОГ и Ni^{2+} до металлического Ni^0. Также в отсутствии растворителя при повышенных температуре и давлении были получены гибриды, содержащие НЧ NiO.

Структуру и состав полученных материалов исследовали методами ИК-Фурье-спектроскопии, рентгенофазового анализа и электронной микроскопии. Для композита Fe_3O_4 /ВОГ ИК-спектры показывают заметное уменьшение интенсивности полос, связанных с кислородсодержащими группами, что свидетельствует о переходе от ОГ к ВОГ, а рентгенофазовый анализ подтверждает сохранение кристаллической фазы Fe_3O_4 и наличие рефлекса при $2\theta=25^o$, соответствующего ВОГ. Электронная микроскопия демонстрирует равномерное распределение наночастиц магнетита среднего размера порядка 18 нм по поверхности и в объёме плёнки без их крупной агрегации.

В никельсодержащих гибридах на основе ОГ, модифицированных солями Ni(II), обработка в сверхкритическом изопропаноле приводит к формированию на поверхности ВОГ дисперсных никелевых наночастиц. Для системы, полученной из $Ni(form)_2$/ОГ, средний размер НЧ Ni составляет 20 нанометров; для гибридов на основе $Ni(acac)_2$/ОГ показано, что термообработка при 280 °C даёт мелкодисперсные НЧ NiO (~5 нм) на частично восстановленном ОГ, тогда как СКИ-обработка при той же температуре обеспечивает полное восстановление Ni^{2+} до металлического Ni^0 с характерным размером около 11 нм и более высокой степенью восстановления углеродной матрицы. Полученные никель-содержащие плёнки также сохраняют компактную морфологию и механическую целостность.

Электрофизические и магнитные измерения показали, что гибридные плёнки Fe_3O_4 /ВОГ обладают низким поверхностным сопротивлением порядка нескольких десятков Ом/см2 и высокой намагниченностью насыщения, достигающей 32,3 эме/г, что позволяет рассматривать их как проводящие магниточувствительные элементы. В случае гибридов Ni/ВОГ величина намагниченности насыщения зависит от содержания никеля: для образцов, синтезированных из $Ni(acac)_2$/ОГ в СКИ, Ms возрастает от суперпарамагнитных значений при

низкой загрузке Ni до ~13,9 эме/г при повышенном содержании металла, тогда как удельное сопротивление изменяется в диапазоне 0,63–2,80 Ом·см. Таким образом, подбор типа наночастиц (Fe_3O_4 или Ni/NiO), их концентрации и режима СКИ-обработки позволяет управлять сочетанием проводящих и магнитных характеристик плёночных гибридных материалов на основе ВОГ.

Использование сверхкритического изопропанола как мягкой восстановительной среды обеспечивает одновременное восстановление оксида графена, частичное «залечивание» дефектов углеродной решётки и формирование дисперсных магнитных наночастиц без применения токсичных химических восстановителей и инертной атмосферы. Такой подход технологически прост, масштабируем и экологически более безопасен, что делает его перспективным для получения гибридных материалов на основе восстановленного оксида графена и магнитных наночастиц для применения в гибкой электронике, тензорезистивных сенсорах и магнитоуправляемых функциональных покрытиях.

Финансирование: работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (Проект № 22-19-00110-П).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Ibragimova V.R., Sapkov I.V., Efremova E.I., Kudryashova Z.A., Rustamova E.G., Korolev D.V., Kunitsyna E.I., Ioni Y.V. Preparation and investigation of composite based on reduced graphene oxide and Fe3O4 nanoparticles. Russian Journal of Inorganic Chemistry, 2025, vol. 70, no. 8, pp. 1089–1096.

2. Ioni Y., Popova A., Maksimov S., Kozerozhets I. Ni nanoparticles on the reduced graphene oxide surface synthesized in supercritical isopropanol. Nanomaterials, 2023, vol. 13, article 2923.

Химическая модификация поверхности первичных частиц углеродных кластеров - ключ к формированию устойчивых суспензий в полярных средах

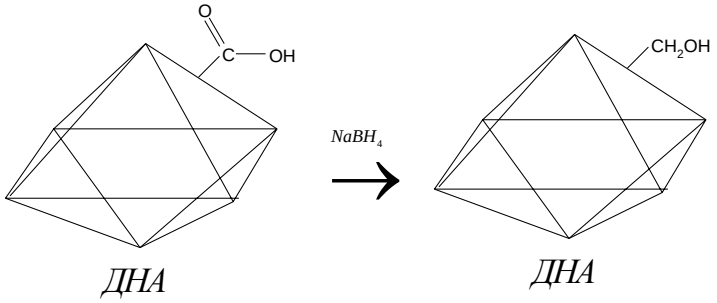
Калинин А.В.[1], Возняковский А.П.

e-mail: ak74frog@mail.ru, voznap@mail.ru

Федеральное государственное бюджетное учреждение «Научно-исследовательский институт синтетического каучука имени С.В. Лебедева», Санкт-Петербург, Россия

В настоящее время значительную проблему представляет собой задача создания эффективных микроабразивов для полирования кремниевых заготовок для изготовления полупроводниковых изделий микроэлектроники. Поскольку элементный кремний сам является очень твёрдым материалом, практически единственным кандидатом на роль эффективного абразива для полирования кремниевых пластин являются детонационные наноалмазы (ДНА). Наиболее удобным применением абразивов для полирования кремниевых пластин является водная суспензия. Однако внедрение такой технологии наталкивается на следующую проблему: коммерчески доступные образцы ДНА категорически не способны к формированию суспензий, устойчивых в течение сколь-нибудь длительного времени, разрушение происходит в течение десятков секунд. Данное явление вызвано тем обстоятельством, что первичные частицы ДНА объединены в значительно более крупные ассоциаты, размеры которых зачастую превышают единицы микрон. Соответственно, чем крупнее частицы, тем менее устойчива суспензия. Известно, что поверхность первичных частиц ДНА изобилует различными функциональными группами, больше всего карбоксильных групп, -COOH. Формирование ассоциатов первичных частиц происходит за счёт образования водородных связей между поверхностными группами разных первичных ДНА.

Мы предприняли попытку, повысить устойчивость суспензии ДНА, снизив прочность образующихся ассоциатов, восстановив карбоксильные группы на поверхности ДНА до первично – спиртовых.



Спиртовые группы также являются гидрофильными, однако прочность образуемых ими водородных связей существенно ниже по сравнению с водородными связями карбоксильных групп, соответственно существенно ниже устойчивость ассоциатов, а, следовательно, и их размер. Таким образом, нам удалось добиться образования суспензий ДНА в воде и диметилсульфоксиде, время жизни которых варьировалось от нескольких часов до нескольких суток. Восстановление карбоксильных групп на поверхности частиц ДНА подтверждено методом ИК-спектроскопии.



Путём тетрагидропиранилирования поверхности ДНА и последующего анализа реакционной смеси методом ГЖХ, проведена оценка содержания поверхностных спиртовых групп. Для различных образцов ДНА эта величина колеблется в пределах 10-15 миллимоль /г.

Другой областью применения подобных суспензий может стать введение ДНА (или других углеродных частиц) в качестве наполнителя в полимер непосредственно при его синтезе. На данный момент этот процесс удалось реализовать при синтезе полимеров акриловой кислоты медицинского назначения[1].

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Grigoriev D. V., Gudkin A. V., Sivtsov E. V., Kalinin A. V., Uspenskaya M. V. Sorptio n and mechanical characteristics of a polymer composite based on acrylic hydrogel and detonatio n nanodiamonds and the kinetics of metronidazole release from it. Polymer Science, Series A, 20 25, vol. 67, № 1.

DFT моделирование графеновых нанолент

Каплун М.В.[1], ***Миронова Т.О.***[1], ***Бескачко В.П.***[1]

e-mail: kaplunmv@susu.ru
[1]*ФГАОУ ВО «Южно-Уральский государственный университет», Челябинск, Россия*

В последнее время, графен стал одним из самых изучаемых материалов в мире нанотехнологий. Он обладает такими свойствами как высокая термическая стабильность и теплопроводностью, высокая подвижностью носителей заряда, но отсутствием запрещенной зоны. Для использования графена в мире наноэлектроники активно изучаются наноструктуры, яляющиеся производными от графена, которые потенциально могут обладать неплохими электронными свойствами, в том числе и необходимой шириной запрещенной зоны.

В работе исследовались электронные свойства графеновых нанолент типа «кресло» (armchair graphene nanoribbons, AGNR) (рис. 1а) в зависимости от пассивации краёв. Расчеты проводились с помощью теории функционала плотности (DFT), с использованием программного пакета SIESTA [1].

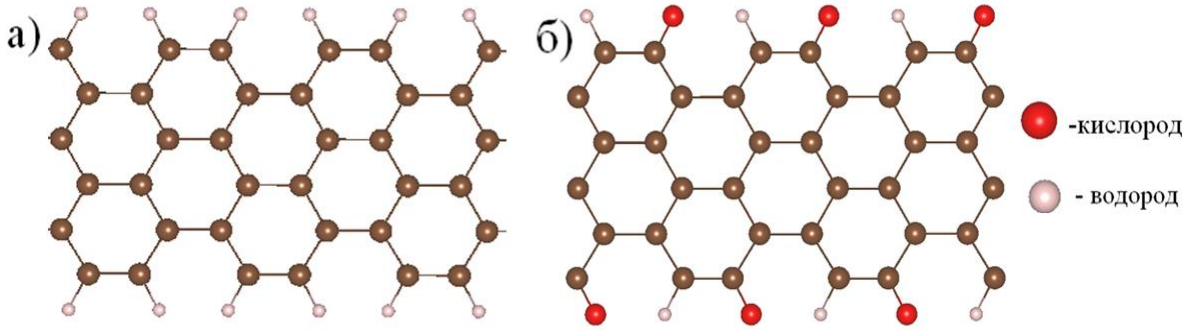


Рис. 1. а) Атомная структура графеновой наноленты типа AGNR, б) AGNR с пассивацией краёв водородом и кислородом.

Каждая исследуемая структура предварительно оптимизировалась, после чего исследовались электронные свойства графеновых нанолент. В программном пакете SIESTA определялась ширина запрещенной зоны, далее с помощью пакета tranSIESTA были получены вольт-амперные характеристики структур с разной пассивацией краёв. Пример такой структуры приведен на рисунке 1б.

Было установлено, что пассивация краёв вносит прямое влияние на электронные свойства графеновых нанолент.

Финансирование: исследование выполнено за счет грантовой программы Виктора Христенко «Шаг в будущее»

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Soler J.M., Artacho E., Gale J.D et al. The SIESTA method for ab initio order-Nmaterials simulation. Journal of Physics: Condensed Matter, 2002, vol. 14, № 11, pp. 2745–2779.

Наноразмерный углеродный композит: формирование, свойства и применение

***Каратышова Т.Я.*[1], *Ткачев Д.В.*[1], *Глуховской Е.Г.*[1]**

e-mail: tatochka338@gmail.com
[1]*ФГБОУ ВО «Саратовский национальный исследовательский государственный университет», Саратов, Россия*

Композитные материалы на основе многостенных углеродных нанотрубок (МУНТ) и проводящего полимера полианилина (ПАНИ) представляют значительный интерес для современной наноэлектроники, сенсорики и энергонакопления. Это обусловлено синергетическим сочетанием высокой электропроводности и механической прочности нанотрубок с электрохимической активностью и возможностью регулирования свойств полимера через легирование [1]. Технология Ленгмюра-Блоджетт (ЛБ) позволяет формировать ультратонкие организованные плёнки с контролем толщины на молекулярном уровне, что критически важно для создания высокопроизводительных устройств нового поколения. Исследования в этой области сместились от фундаментального изучения формирования монослоев к практической интеграции композитных пленок в функциональные сенсоры и гибкую электронику. В настоящей работе даётся анализ методов формирования, структурных особенностей и функциональных свойств монослоев нанокомпозита МУНТ/ПАНИ [2].

Ключевой стадией процесса является получение стабильной гомогенной дисперсии композита. МУНТ склонны к сильной агрегации из-за ван-дер-ваальсовых взаимодействий, поэтому используется поверхностно-активное вещество (ПАВ), такое как арахиновая кислота (АК). АК выполняет функцию стабилизации нанотрубок в органическом растворителе. Для легирования ПАНИ использовали раствор соляной кислоты, который переводит полимер в проводящую форму – эмеральдиновую соль. Процесс формирования включает нанесение раствора композита в летучем органическом растворителе (смесь хлороформа с ДМФА) на поверхность воды в ванне Ленгмюра, выдержку 10-15 минут для полного испарения растворителя и сжатие монослоя подвижными барьерами со постоянной скоростью при одновременной регистрацией зависимости «поверхностное давление – площадь». По полученным изотермам определялись фазовые переходы и диапазон значений оптимального давления в момент переноса монослоя на твёрдую подложку (15-25 мН/м). При этом обеспечивается однородность плёнки без признаков коллапса. Исследования показывают, что функционализация поверхности МУНТ полианилином снижает агрегацию, способствуя формированию ориентированной сборки на границе раздела фаз вода-воздух [3-5].

Морфология плёнок, изученная методами атомно-силовой микроскопии (АСМ) и сканирующей электронной микроскопии (СЭМ), выявляет формирование сетчатой структуры с выровненными нанотрубками вдоль направления сжатия барьеров [6]. Средняя шероховатость многослойных структур варьируется от 2 до 15 нм в зависимости от числа перенесенных слоев. Электропроводность нанокомпозитных плёнок ЛБ значительно превышает проводимость чистого ПАНИ благодаря формированию непрерывной перколяционной сети МУНТ [1]. Типичные значения проводимости достигают 10–100 См/см, что на порядок выше, чем у чистого полимерного аналога. Кроме того, наблюдается выраженная анизотропия проводимости: вдоль ориентации нанотрубок она может быть в 2-5 раз выше, чем в поперечном направлении, что важно для проектирования анизотропных проводников [2].

Высокое отношение поверхности к объёму и электрохимическая активность делают плёнки ЛБ МУНТ/ПАНИ идеальными для химической и биологической сенсорики. Такие наноразмерные композитные структуры могут найти применение в высокочувствительных сенсорах для детектирования газов (NH_3, NO_2) с пределом обнаружения 1–10 ppm. В области

гибкой электроники композитные плёнки могут использоваться для создания прозрачных проводящих электродов на полимерных подложках, сохраняющих свойства при многократном изгибе [6]. Очень перспективным является применение таких материалов в суперконденсаторах, где удельная ёмкость композита достигает 200–500 Ф/г за счет сочетания двойного электрического слоя нанотрубок и фарадеевских процессов окисления-восстановления полианилина [7]. Уникальные свойства такого композита в биоэлектронике способны обеспечить прямой электронный перенос для иммобилизации ферментов, что также может иметь широкие перспективы практического применения.

Технология Ленгмюра-Блоджетт обеспечивает прецизионный контроль над архитектурой наноразмерных композитов МУНТ/ПАНИ. Оптимизация параметров формирования, включая выбор ПАВ, растворителя и давления переноса, позволяет получать плёнки с улучшенными электрофизическими характеристиками. Дальнейшее развитие направления связано с масштабированием процесса для промышленного производства и внедрением экологически безопасных технологий диспергирования без токсичных органических растворителей. Перспективы связаны с созданием самовосстанавливающихся композитов.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Abdulla S., Pullithadathil B. Unidirectional Langmuir–Blodgett-Mediated Alignment of Polyaniline-Functionalized Multiwalled Carbon Nanotubes for NH3 Gas Sensor Applications [Langmuir], 2020, vol. 36, № 39, pp. 11618-11628.

2. Uchida R. Synthesis of polyurethane/vinyl polymer hybrids with unexpected mechanical properties using a macro chain transfer agent [RSC Advances], 2025, vol. 15, pp. 20233-20238

3. Hassoon O.A.H., et al. Production of photosensitive structures based on CdSe nanoparticles and carbon nanotubes by physical methods [Modern Electronic Materials], 2025. vol. 11, №. 1, pp. 3-11.

4. Hassoon O.A.H., et al. Formation of conductive layers based on carbon nanotubes by the Langmuir method [Journal of Advanced Materials and Technologies], 2025, vol. 10, №. 1, pp. 8-18.

5. Каратышова Т.Я. и др. Формирование гибридных материалов на основе углеродных нанотрубок и полианилина [Нанотехнологии и наноматериалы: Современное состояние и перспективы развития : Сборник тезисов V Международной научно-технической конференции], 2025, с. 40.

6. Kausar A. Survey on Langmuir–Blodgett Films of Polymer and Polymeric Composite [Polymer-Plastics Technology and Engineering], 2017, vol. 56, № 9, pp. 932–945.

7. Kaiyue C., et al. Facile synthesis of self-assembled carbon nanotubes/dye composite films for sensitive electrochemical determination of Cd(II) ions [Nanotechnology], 2018, vol. 29, pp. 445603.

Композитная пленка на основе триангулированного борофена и борной нанотрубки: исследования электронных свойств методом DFT

Колосов Д.А.[1]***, Глухова О.Е.***[1,2]

e-mail: kolosovda@bk.ru

[1]*ФГБОУ ВО «Саратовский национальный исследовательский государственный университет имени Н.Г. Чернышевского», Саратов, Россия*

[2]*Первый Московский государственный медицинский университет имени И.М. Сеченова, 119991, Москва, Россия*

Исследование наноматериалов с высокой теоретической емкостью и улучшенными электрофизическими свойствами для использования в качестве анода литий-ионного аккумулятора (ЛИА) является одной из ключевых задач разработки источников хранения энергии следующего поколения. Двумерные аллотропные формы бора (борофен) привлекают внимание исследователей благодаря высокой удельной емкости, низкими диффузионными барьерами при миграции ионов лития, а также металлическому типу проводимости [1]. В частности, одним из самых многообещающих кандидатов на роль анода ЛИА является триангулированный борофен, обеспечивающий крайне низкую величину диффузионного барьера для ионов лития (~2.6 мэВ) за счет своей гофрированной структуры [2] и металлический тип проводимости. В тоже время, как показали исследования [3], синтезируемые борные нанотрубки (БНТ) также обладают крайне высокой электропроводностью вне зависимости от типа края (зигзаг/кресло) и типа борофена из которого она составлена. Однако для всех типов синтезируемых борофенов и борных нанотрубок стоит проблема низкой стабильности атомистической структуры и склонность к агломерации. В связи с этим поиск новых гибридных наноматериалов для использования в качестве анодв ЛИА, позволяющих сохранить уникальные свойства борофена и высокую электропроводность борных нанотрубок является актуальной задачей современного материаловедения. Данная работа посвящена теоретическому исследованию композитного материала на основе двух листов триангулированного борофена с расположенной между ними однослойной борной нанотрубкой типа β12.

Исследование выполнено в рамках теории функционала плотности (DFT) в программном пакете SIESTA. Энергия формирования композита рассчитана как разница полной энергии композита и bcc альфа фазы бора. Удельная теоретическая емкость определялась из анализа максимальной концентрации атомов лития в структуре. Электропроводящие свойства в двух направлениях атомистической решетки были рассчитаны с использованием формализма Ландауэра–Буттикера и метода неравновесных функций Грина–Келдыша (NEGF). В результате исследования установлено, что энергия формирования рассмотренного композита (0.643 эВ) ниже, чем для монослоя борофена (0.681 эВ) и БНТ (0.701 эВ), что свидетельствует о термодинамической выгодности полученной структуры. Вектора трансляции полученной равновесной композитной пленки составляют Lx = 14.52 Å, Ly = 5.01 Å. Теоретическая удельная емкость композита для ионов лития составила 590.3 мАч·г$^{-1}$, что превышает емкость графитового анода (372 мАч·г$^{-1}$) на 58.7%. На основе расчетов функции пропускания электронов определено значение электрического сопротивления как вдоль гофрированной поверхности суперъячейки, так и вдоль триангулированной стороны. В табл. 1 представлены сравнительные результаты расчета сопротивления для монослоя триангулированного борофена и предложенной композитной структуры.

Таблица 1. Рассчитанные величины электрического сопротивления

Атомистическая структура	Вдоль гофрированной стороны	Вдоль триангулированной стороны
Композитная пленка	0.62 кОм	9.9 кОм
Борофен	6.4 кОм	25.2 кОм

Как видно и таблицы, наличие БНТ в структуре существенно повысила электропроводность борофена в двух направлениях решетки. Вдоль гофрированной стороны сопротивление снизилось более чем в 10 раз, вдоль триангулированной стороны более 2.5 раз. Стоит отметить, что наличие БНТ, расположенной между двумя монослоями борофена должно предотвратить агломерацию слоев и повысить пористость анодного материала для лучшего проникновения атомов лития в структуру решетки. На рисунке 1 представлена атомистическая модель полученной композитной пленки. В процессе геометрической релаксации и поиска минимума полной энергии кристаллическая решетка БНТ удлинилась вдоль оси Z и образовала ковалентные связи с атомами бора, входящие в состав триангулированного борофена. Сохранение гофрированной структуры решетки при этом поспособствует низкоэнергетическому механизму диффузии атомов лития и, в перспективе, увеличит скорость заряда и разряда анодного материала в составе ЛИА.

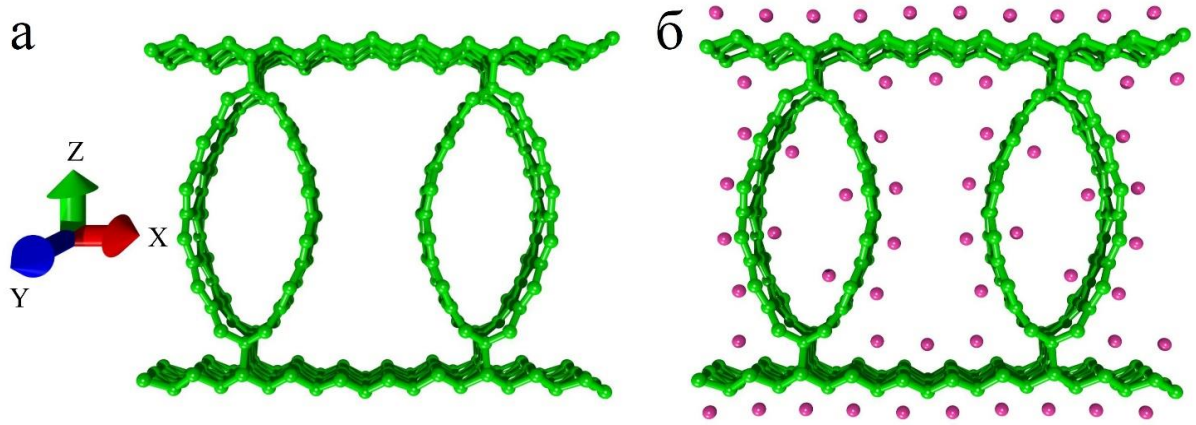


Рис. 1. Композитная пленка триангулированный борофен/БНТ (а) в отсутствии атомов лития; (б) присутствии атомов лития.

Финансирование: Исследование выполнено при финансовой поддержке Российского научного фонда (проект № 24-79-00242).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Mannix A. J., Zhou X.-F., Kiraly B., Wood J. D., Alducin D., Myers B. D., Liu X., Fisher B. L., Santiago U., Guest J. R., Yacaman M. J., Ponce A., Oganov A. R., Hersam M. C., Guisinger N. P. Synthesis of borophenes: Anisotropic, two-dimensional boron polymorphs. Science, 2015, vol. 350, № 6267, pp. 1513–1516.

2. Jiang H. R., Lu Z., Wu M. C., Ciucci F., Zhao T. S. Borophene: A promising anode material offering high specific capacity and high rate capability for lithium-ion batteries. Nano Energy, 2016, vol. 23, pp. 97–104.

3. Liu F., Shen C., Su Z., Ding X., Deng S., Chen J., Xu N., Gao H. Metal-like single crystalline boron nanotubes: Synthesis and in situ study on electric transport and field emission properties. Journal of Materials Chemistry, 2010, vol. 20, № 11, p. 2197.

Устойчивость гидрозоля отрицательно заряженного детонационного наноалмаза в растворах ионогенных поверхностно-активных веществ

***Коняева Е.А.*[1], *Лопатина Е.С.*[1], *Ермакова Л.Э.* [1], *Волкова А.В.*[1]**

e-mail: st117538@student.spbu.ru

[1]*ФГБОУ ВО «Санкт-Петербургский государственный университет», Санкт-Петербург, Россия*

Диапазон применения детонационного наноалмаза (ДНА) достаточно широк – медицина, биология, физика, химия. ДНА обладает возможностью функционализации поверхности и самой низкой цитотоксичностью среди других углеродных материалов. Изучение устойчивости водных золей ДНА важно, как с практической, так и фундаментальной точки зрения [1-4]. Основная сложность использования дисперсий детонационного алмаза – склонность к коагуляции, особенно при изменении pH и увеличении ионной силы дисперсионной среды (например, при использовании физиологического раствора). Хорошо известными эффективными стабилизаторами дисперсных систем являются поверхностно-активные вещества (ПАВ). Добавление ПАВ к гидрозолю ДНА может приводить как к дезагрегации и стабилизации частиц, так к их коагуляции, причем эффективность действия поверхностно-активных веществ сильно зависит от свойств поверхности и размера частиц ДНА, вида и концентрации ПАВ, длины углеводородного хвоста.

В качестве объекта был выбран разбавленный (0.01 мас.%) водный нанозоль отрицательно заряженных частиц ДНА, приготовленный из концентрированной (5 мас.%) водной дисперсии «Single-Digit Nanodiamonds» производства «PlasmaChem», Германия с размером первичных наночастиц 4 – 6 нм. В настоящей работе было изучено влияние концентрации (в области до ККМ (10^{-6} - 6×10^{-2} М)) и длины углеводородной цепи катион- и анионактивных ПАВ на агрегативную устойчивость гидрозоля методами турбидиметрии и динамического рассеяния света, а также на электрокинетические свойства (положение изоэлектрической точки (ИЭТ), дзета-потенциал) частиц ДНА методом лазерного допплеровского электрофореза. Полученные данные сопоставлены с таковыми в растворах хлорида натрия. В рамках классической теории ДЛФО [5-7] при условии постоянства поверхностного заряда были также проведены расчеты энергии парного взаимодействия частиц ДНА и факторов устойчивости.

Установлено, что адсорбция органического противоиона приводит к появлению области положительных значений дзета-потенциала, при этом ИЭТ смещается в область более разбавленных растворов при увеличении длины углеводородной цепи, что сопровождается уменьшением порогов коагуляции и появлением второй зоны устойчивости при меньших концентрациях ПАВ. Показано, что в области отрицательных значений дзета-потенциала определяющую роль в устойчивости играет ионно-электростатический фактор, тогда как в области положительных при относительно невысоком содержании ПАВ – гидрофобные взаимодействия. В предмицеллярной области устойчивость золя ДНА обусловлена дополнительной гидрофилизацией поверхности вследствие формирования на ней гемимицелл.

Агрегативная устойчивость нанозоля ДНА в растворах анионактивных ПАВ в области концентраций ниже порога медленной коагуляции в растворе NaCl обусловлена значительными силами ионно-электростатического отталкивания. Установлено также, что адсорбция органического аниона по механизму гидрофобного связывания может приводить в зависимости от длины и вида углеводородной цепи как к росту абсолютной величины дзета-потенциала, так и увеличению порога быстрой коагуляции, и расширению области медленной коагуляции по сравнению с индифферентным электролитом при близких электрокинетических характеристиках.

В работе также показано, что ионогенные ПАВ не могут быть использованы в качестве эффективных стабилизаторов нанозолей ДНА по отношению к увеличению концентрации

солевого фона (NaCl) в связи с тем, что основным фактором стабилизации является ионно-электростатический, а не стерический.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Даниленко В. В. Способ получения детонационных наноалмазов. Патент РФ, 2007.

2. Shenderova O. A. et al. The properties and applications of nanodiamonds. Nature Nanotechnology, 2011, vol. 6, № 1, pp. 30–37.

3. Gibson N. et al. [Название статьи не указано]. Environmental Science & Technology, 2014, vol. 48, № 5, pp. 2780–2788.

4. Mochalin V. N., Shenderova O., Ho D., Gogotsi Y. The properties and applications of nanodiamonds. Nature Nanotechnology, 2012, vol. 7, № 1, pp. 11–23.

5. Дерягин Б. В., Ландау Л. Д. и др. Теория устойчивости сильно заряженных лиофобных золей и слипания сильно заряженных частиц в растворах электролитов. ЖЭТФ, 1941, т. 11, вып. 2, с. 133–149.

6. Дерягин Б. В. и др. Теория устойчивости коллоидов и тонких плёнок. Москва: Наука, 1986. 268 с.

7. Дерягин Б. В., Чураев Н. В., Муллер В. М. Поверхностные силы. Москва: Наука, 1985. 398 с.

Перспективы использования углеродных точек при формировании электрохимического сенсора на гидроксиламин

Косаренина М.М.[1]

e-mail: mari.kosarenina@mail.ru
[1]*ФГБОУ ВО Тульский государственный университет, Тула, Россия*

Углеродные точки (УТ) демонстрируют высокий потенциал применения в разнообразных сферах человеческой деятельности [1]. Высокая электрокаталитическая активность УТ обусловливают их использование в конструировании электрохимических систем, а их способность эффективно сорбировать органические соединения за счёт гидрофобных взаимодействий, π-π-стекинга и образования водородных связей, обеспечивает создание хемосенсоров с улучшенными метрологическими характеристиками [2,3].

Гидроксиламин – основной промежуточный продукт в производстве ε-капролактама, фармацевтических и лекарственных веществ. Это соединение признано мутагенным и токсичным для живых организмов, из-за чего контроль содержания гидроксиламина в продукции важно для биохимии и промышленности [4]. Наиболее распространенные методы его определения сложны из-за сочетания различных способов детекции или дериватизации. Стеклоуглеродный электрод не чувствителен к гидроксиламину, поэтому важно оценить возможность применения углеродных точек в качестве модификатора рабочей поверхности электрода для определения данного соединения в объектах окружающей среды.

Модификацию механически отполированной рабочей поверхности стеклоуглеродного электрода проводили путем нанесения 8 мкл суспензии 0,4% УТ и высушивания при комнатной температуре. Для оценки чувствительности модифицированного и исходного стеклоуглеродного электрода регистрировали циклические вольтамперограммы (ЦВА). Измерения проводили при помощи электрохимической станции CS серии «CORRTEST» (Corrtest Instruments, г. Ухань, Китай) в режиме «циклическая вольтамперометрия» в трехэлектродной ячейке: рабочим электрод – модифицированный УТ стеклоуглеродный электрод, вспомогательный электрод – графитовый, электрод сравнения – насыщенный хлоридсеребряный электрод (рис.1). Условия регистрации ЦВА: фоновый электролит 0,1 моль/дм^3; гидроксиламин гидрохлорид в концентрации в интервале от 9 до 10 ммоль/дм^3; скорость развертки потенциала 50 мВ/с; диапазон развертки потенциалов от -0,9 до 0,9 В.

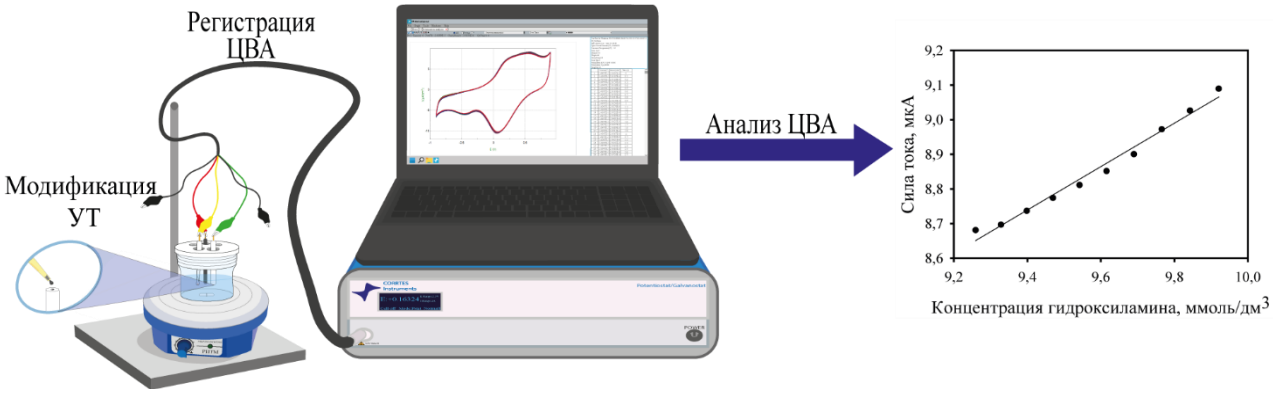


Рис.1. Схема установки и эксперимента для детекции гидроксиламина электрохимическим сенсором на основе стеклоуглеродного электрода, модифицированного углеродными точками

Результаты проведенных исследований показали, что при модификации рабочей поверхности электрода УТ в присутствии гидроксиламина на ЦВА наблюдается пик,

свидетельствующие об окислении гидроксиламина. Коэффициент чувствительности разработанного хемосенсора составил 0,65 мкА×дм^3/ммоль.

Финансирование: Исследование выполнено при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования РФ в рамках государственного задания № FEWG-2024-0003 (Биокаталитические системы на основе клеток микроорганизмов, субклеточных структур и ферментов в сочетании с наноматериалами).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Xie Y., Liu T., Chu Z., Jin W. Recent advances in electrochemical enzymatic biosensors based on regular nanostructured materials. Electroanalytical Chemistry, 2021, vol. 893, P. 115328

2. Xia C., Zhu S., Feng T., Yang M., Yang B. Evolution and synthesis of carbon dots: from carbon dots to carbonized polymer dots. Advanced Science, 2019, vol. 6, №. 23, P. 1901316.

3. Tuerhong M., Yang X.U., Xue-Bo Y.I.N. Review on carbon dots and their applications. Chinese Journal of Analytical Chemistry, 2017, vol. 45, №. 1, pp. 139-150.

4. Soler-Jofra A., Pérez J., Van Loosdrecht M. C. M. Hydroxylamine and the nitrogen cycle: a review. Water Research, 2021, vol. 190, P. 116723

О влиянии подложек на поверхностную адсорбцию бора на графене и углерода на борофене

Кочаев А.И. [1]

e-mail: a.kochaev@gmail.com
[1]*ФГБОУ ВО «Ульяновский государственный университет», Ульяновск, Россия*

Формирование вертикальных гетероструктур на основе двумерных материалов, таких как графен и борофен, открывает широкие перспективы для создания элементной базы посткремниевой электроники. Однако прямой синтез подобных гибридных систем, например, осаждение борофена на графен или графена на борофен, сопряжен с существенными трудностями, обусловленными сложностью контроля роста на начальных стадиях [1]. В данной работе представлены результаты теоретического исследования адсорбционных свойств и механизмов формирования малых кластеров в системах «бор на графене» и «углерод на борофене» с использованием инструмента атомистического *ab initio* моделирования.

В рамках подхода периодических суперячеек построены и полностью оптимизированы модели, содержащие от одного до трех атомов бора (углерода), адсорбированных на поверхность графена (борофена). Системы (рис. 1 и 2) рассматривались как в свободном состоянии, так и осажденными на различные подложки: металлические Au(111), Ag(111), Ir(111), Cu(111) и диэлектрическую *h*-BN. Для каждой из них рассчитывались полные энергии, геометрические параметры и энергия адсорбции адатомов.

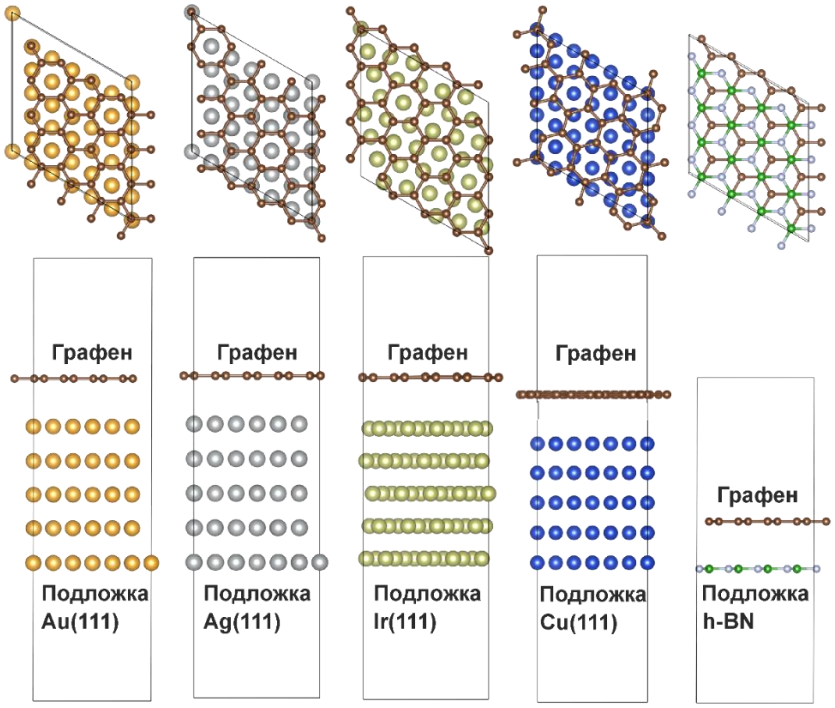


Рис. 1. Изображения суперячеек «графен–подложка».

Результаты моделирования выявили принципиальное различие в поведении двух исследуемых систем. Для системы «бор на графене» установлено, что, несмотря на прочное связывание одиночных атомов бора (энергия адсорбции достигает –1.6 эВ/атом), характерное для хемосорбции во всех симметричных положениях (H, B, T), с увеличением размера кластера энергия связи в пересчете на один атом резко падает (до –0.53 эВ/атом для тримера). Начиная с тримера, кластеры бора проявляют выраженную тенденцию к формированию объемных структур, а не плоскостных монослоев. Это указывает на высокую вероятность островкового механизма роста при синтезе борофена на графене. Исключением является лишь

высокоактивная подложка Ir(111), способная частично стабилизировать плоскостные конфигурации димеров и тримеров.

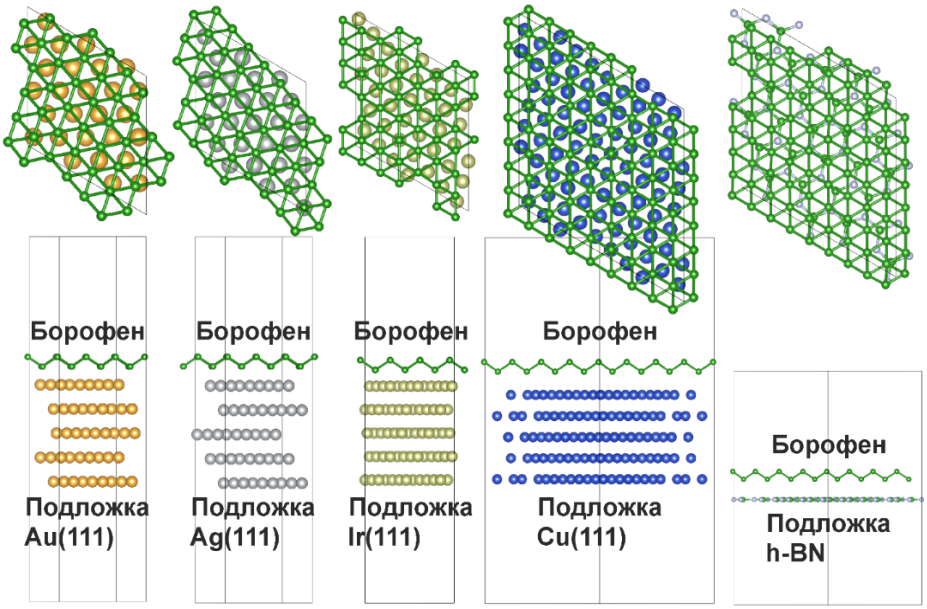


Рис. 2. Изображения суперячеек «борофен–подложка».

В противоположность этому, система «углерод на борофене» продемонстрировала значительно более высокий потенциал для формирования непрерывного покрытия. Энергии адсорбции углерода на борофене кратно превышают значения для бора на графене (до –7.55 эВ/атом для несвязанной двухатомной конфигурации на подложке *h*-BN), что свидетельствует об исключительной термодинамической стабильности формирующихся связей. Ключевым результатом является склонность углерода к образованию прочных ковалентных связей C–C и C=C с формированием плоскостных линейных цепочек, а не объемных кластеров. Наилучшей подложкой, обеспечивающей максимальную энергию адсорбции для углеродных цепочек (–1.68 эВ/атом), оказался гексагональный нитрид бора *h*-BN. В отличие от металлов, сильно взаимодействующих с борофеном (Ir, Cu) и подавляющих его поверхностную активность, *h*-BN стабилизирует систему за счет электростатического допирования, сохраняя её естественную химическую активность по отношению к углероду.

Таким образом, результаты DFT-моделирования показывают, что система «графен-на-борофене» является термодинамически значительно более предпочтительной для синтеза по сравнению с обратной конфигурацией. Критическую роль играет выбор подложки: использование *h*-BN открывает новые перспективы для создания стабильных углеродных покрытий на борофене с контролируемой морфологией.

Финансирование: работа выполнена при финансовой поддержке РНФ (грант № 25-23-00077).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Львов П.Е., Кочаев А.И. Фазово-полевое моделирование формирования двумерных материалов в процессе эпитаксиального роста. Физика твердого тела, 2025, том 67, № 10, С. 1937–1946.

Влияние режимов ультразвукового диспергирования углеродных нанотрубок на электрохимические свойства углеродных покрытий титана

Кузнецова Е.А.[1], ***Ефремова К.Д.***[1,2], ***Герасименко А.Ю***[1,2].

e-mail: kyzya.evgen8@yandex.ru

[1]*Национальный исследовательский университет «МИЭТ», 124498, Россия, г. Москва, г. Зеленоград, площадь Шокина, дом 1*

[2]*Первый Московский государственный медицинский университет имени И.М. Сеченова 119048, Россия, г. Москва, ул. Трубецкая, д. 8, стр. 2*

Повышение эффективности и безопасности передачи электрического сигнала в имплантируемых нейростимулирующих устройствах требует оптимизации электродных материалов. Титан и его сплавы широко применяются благодаря высокой биосовместимости и коррозионной стойкости, однако их высокая импедансная характеристика и ограниченная зарядовая емкость сужают безопасный диапазон стимуляции и могут вызывать необратимые фарадеевские процессы на границе электрод–ткань [1].

Перспективным решением является модификация поверхности титана покрытиями на основе одностенных углеродных нанотрубок (ОУНТ), обладающих высокой электропроводностью, большим аспектным соотношением и способностью формировать протяженные перколяционные сети. Это увеличивает эффективную площадь контакта с тканью и улучшает кинетику зарядообмена [2].

Цель работы заключалась в изучении влияния режимов ультразвуковой обработки дисперсных сред ОУНТ на электрохимические характеристики формируемых покрытий на титане и определении оптимальных параметров обработки для максимизации зарядовой емкости электродов. В работе проведено систематическое варьирование мощности ультразвукового диспергирования в присутствии дезоксихолата натрия. Качество дисперсий оценивали методами динамического светорассеяния и УФ-видимой спектроскопии, а покрытия формировали методом распыления на титановую подложку. Электрохимические свойства покрытий исследовали циклической вольтамперометрией в физиологически релевантной среде.

Установлено, что при увеличении мощности до определенного диапазона средний гидродинамический размер агломератов уменьшается, доля мелкодисперсной фракции возрастает, что сопровождается повышением оптической плотности. При дальнейшем росте мощности наблюдается появление частиц малого размера, свидетельствующее о начале фрагментации нанотрубок. Покрытия формировали методом распыления на титановые подложки, после чего их электрохимические характеристики исследовали методом циклической вольтамперометрии в физиологически релевантной среде.

Установлено, что различная мощность ультразвуковой обработки оказывает немонотонное влияние на электрохимические свойства покрытий. При относительно низких уровнях энергии сохраняются крупные агломераты, препятствующие формированию эффективной проводящей сети, что приводит к ограниченной зарядовой емкости. Увеличение мощности до оптимального диапазона обеспечивает формирование однородной перколяционной структуры и сопровождается ростом зарядовой емкости до максимальных значений, многократно превышающих показатель немодифицированного титана. Дальнейшее повышение мощности приводит к разрушению структуры нанотрубок, увеличению дефектов и уменьшению емкости. Полученные покрытия демонстрируют высокую стабильность при циклировании, что свидетельствует об их устойчивости к электрохимической деградации.

Финансирование: Работа выполнена в рамках крупного научного проекта при финансовой поддержке Российской Федерации в лице Министерства науки и высшего

образования Российской Федерации в рамках соглашения No 075-15-2024-555 от 25 апреля 2024 года.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Abbott J. R., Joshi-Imre A., Cogan S. F. In vitro electrochemical properties of titanium nitride neural stimulating and recording electrodes as a function of film thickness and voltage bia sing. 2021 43rd Annual International Conference of the IEEE Engineering in Medicine & Biology Society (EMBC). IEEE, 2021, pp. 6647–6650.

2. Cogan S. F., Ludwig K. A., Welle C. G., Takmakov P. Tissue damage thresholds during therapeutic electrical stimulation. J. Neural Eng., 2016, vol. 13, № 2, p. 021001.

Повышение физико-механических и трибологических свойств полимерных композиционных материалов для fdm-печати: проблемы и перспективы

Кунафина М.Т.[1], Протопопова Ю.Д.[1]

e-mail: rusak.yui@gmail.com

[1]Филиал ФГБОУ ВО «Уфимский университет науки и технологий» в г.Кумертау, 453300, г. Кумертау, Российская Федерация

В современной промышленности (машиностроении, авиационной и космической технике) для прототипирования и создания функциональных деталей все активнее внедряются аддитивные технологии, в частности метод FDM-печати. Однако применение чистых термопластов, таких как АБС-пластик, имеет критические ограничения из-за их низких трибологических характеристик, что делает невозможным использование напечатанных изделий в узлах трения. Потери энергии от износа составляют огромную долю мирового энергопотребления, и их снижение является актуальной научно-технической задачей. Для решения этой проблемы разрабатываются полимерные нанокомпозиты, армированные углеродными нанотрубками (УНТ).

Ключевыми барьерами при создании износостойких нанокомпозитов являются агломерация УНТ из-за сил Ван-дер-Ваальса и недостаточная адгезия на границе раздела «полимерная матрица - наполнитель». Различие коэффициентов упругости фаз приводит к возникновению сдвиговых напряжений при трении, вызывающих отслоение трубок, образование микротрещин и ускоренное разрушение материала. Превышение оптимальной концентрации наполнителя (свыше 10 об.%) ведет к неконтролируемой агломерации и резкому падению износостойкости.

В работе представлен анализ современных методов модификации нанокомпозитов для FDM-печати по четырем ключевым направлениям:

1. *Повышение износостойкости.* На основе обзора Li и Chang [1] установлено, что введение наночастиц в объеме до 5 об.% или коротких волокон в концентрации 10–30 об.% позволяет снизить скорость трибологического износа напечатанных деталей в 3–10 раз за счет формирования армирующей сетки.

2. *Химическая модификация углеродных нанотрубок (УНТ).* В работах Каблова и др. [2] и Пыхтина и др. [3] исследовано применение ковалентной и нековалентной функционализации УНТ. Показано, что диспергатор Tego Dispers 690 обеспечивает равномерное распределение трубок, снижает порог перколяции до 1,5 мас.% и повышает износостойкость на 35%. Диспергатор МС-51, напротив, формирует жесткие оболочки вокруг агломератов, что ведет к охрупчиванию филамента.

3. *Электромагнитная постобработка.* Лебедева и др. [4] выявили, что кратковременное (300 с) воздействие СВЧ-излучения на композиты АБС с 3 мас.% углеродного волокна вызывает локальный нагрев наполнителя, улучшает межфазное сцепление и увеличивает прочность на разрыв на 15–20%, что создает предпосылки для повышения износостойкости.

4. *Применение сверхтермостойких матриц.* Александрова и др. [5] разработали препреги на основе непрерывного углеродного волокна и полиимидных связующих. Доказано, что использование олигомерных аппретов позволяет получить качественную пропитку и сохранить гибкость нити для печати деталей, способных работать при температурах свыше 400°C.

Технологические вызовы и выводы. Несмотря на улучшение свойств, исследователи сталкиваются с серьезными проблемами на этапе экструзии и 3D-печати: агломерацией наночастиц при высоких концентрациях, резким повышением вязкости расплава, забиванием сопла принтера и обрывами нити. Критически важной является разобщенность исследований

- отсутствуют работы, связывающие всю цепочку от функционализации до прямых трибологических испытаний. Сделан вывод о необходимости проведения комплексных исследований, сочетающих оптимизированную функционализацию УНТ (Tego Dispers 690), использование гибридных микро- и нанонаполнителей для проверки синергетического эффекта и пост-обработку деталей СВЧ-излучением для достижения максимальной износостойкости.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Александрова Д. С., Богдановская М. В., Егоров А. С., Выгодский Я. С. Создание новых композиционных материалов для 3D-печати на основе полиимидных связующих и непрерывного углеродного волокна. Труды Крыловского государственного научного центра, 2021, спец. вып. 2, с. 97–107.

2. Каблов Е. Н., Пыхтин А. А., Сорокин А. Е., Ларионов С. А. Влияние способа функционализации углеродных нанотрубок на технологические и эксплуатационные свойства филаментов для FDM-печати на основе АБС-пластика. Российские нанотехнологии, 2022, т. 17, № 6, с. 745–752.

3. Лебедева Е. А., Астафьева С. А., Трухинов Д. К., Корнилицина Е. В., Нуруллаев Э. М. Механические характеристики сополимера акрилонитрила, бутадиена и стирола, подвергнутого воздействию сверхвысокочастотного излучения. Химическая физика, 2023, т. 42, № 2, с. 83–87.

4. Li Z., Chang L. Development of wear-resistant polymeric materials using fused deposition modelling (FDM) technologies: A review. Lubricants, 2025, vol. 13, № 3, p. 98.

5. Пыхтин А. А., Сорокин А. Е., Ларионов С. А., Лонский С. Л. Исследование влияния нековалентных модификаторов на структуру и свойства полимерных филаментов для FDM-печати на основе АБС-пластика и углеродных наночастиц. Труды ВИАМ, 2021, № 10 (104), с. 36–44.

Управление резистивными и емкостными свойствами структур Ti/HfOx/TiN для нейроморфных применений

***Кучумов И. Д.*[1], *Мартышов М. Н.*[1], *Форш П. А.*[1]**
e-mail: ikuchum@gmail.com
[1] *Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, Москва, Россия*

В настоящее время наблюдается активный переход вычислительных систем от классической архитектуры фон Неймана к нейроморфным нейронным сетям [1], функционирующим по аналогии с человеческим мозгом, который состоит из нейронов и связывающих их синапсов. Такой подход может значительно повысить энергоэффективность и скорость работы вычислительных систем. Переход к такой архитектуре становится возможным благодаря открытию мемристора - электрического элемента, способного имитировать работу синапса в мозге [2], представляющим собой простую конфигурацию металл-диэлектрик-металл. Его сопротивление может варьироваться между несколькими уровнями за счет формирования и разрушения токопроводящей нити (филамента) под воздействием внешнего напряжения. Явление резистивного переключения было зафиксировано в ряде неорганических соединений (TiO_2, SiO_2, ZnO и др.), сложных нанокомпозитах, а также в органических полимерах.

Похожим эффектом обладают сегнетоэлектрические структуры. Они способны изменять свою поляризацию, а как следствие и емкость, под действием внешнего электрического поля [3], их работу также сравнивают с синапсами и другими элементами в головном мозге. В отличии от мемристоров они не выстраивают филаментов, что делает их переключения более надежными и энергоэффективными. Оксид гафния HfO_2 является одним из немногих материалов, в котором наблюдаются оба вида переключений, также он совместим с КМОП технологиями и не теряет своих свойств даже при нанометровых размерах. Для проявления сегнетоэлектрического эффекта в HfO_2 требуется, чтобы его кристаллическая решетка находилась в полярной орторомбической фазе $Pca2_1$ [4]. Возникновение и устойчивость данной фазы определяются множеством технологических факторов, поэтому исследователи продолжают поиск оптимальных режимов осаждения сегнетоэлектрических пленок HfO2.

В данной работе изучается структура Ti/HfO_x/TiN, в которой сегнетоэлектрический слой оксида гафния получен методом магнетронного распыления. Проведен анализ вольт-фарадных (рис.1) и вольт-амперных (рис.2) характеристик, который показывает возможность наших структур переключаться как между емкостными, так и между резистивными состояниями. Для лучшего понимания процессов переключения были использованы методы импедансной спектроскопии, позволившие построить эквивалентную электрическую цепь наших структур. Данные результаты позволяют рассматривать структуры в качестве универсальных кандидатов для построения нейронных сетей на базе как мемристоров, так и мемконденсаторов. Более того, это открывает возможности для их использования в системах с переменным током, а также для комбинирования обоих типов переключения в целях тонкой настройки при работе со сложными нейросетевыми архитектурами.

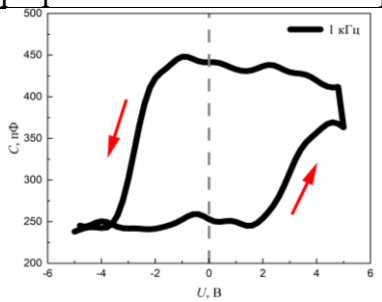


Рис. 1. Вольт-фарадная характеристика структуры Ti/HfO_x/TiN

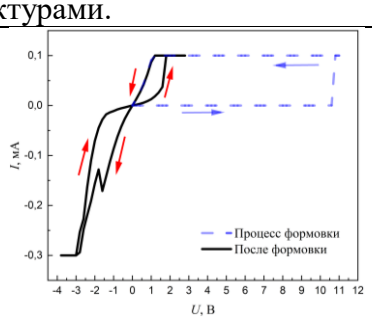


Рис. 2. Вольт-амперные характеристики структуры Ti/HfO_x/TiN до и после формовки филамента

Финансирование: Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда No 23-19-00268, https://rscf.ru/project/23-19-00268/.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Marković D., Mizrahi A., Querlioz D., Grollier J. Physics for neuromorphic computing. Nature Reviews Physics, 2020, vol. 2, pp. 499–510.

2. Strukov D.B., Snider G.S., Stewart D.R., Williams R.S. The missing memristor found. Nature, 2008, vol. 453, pp. 80–83.

3. Wang X., Ye S., Cui B., Li Y.-C., et al. Analog memristive behavior in a layered structure of TiOx/γ-Al2O3. Nano Energy, 2025, vol. 140, 111011.

4. Schroeder U., Park M.H., Mikolajick T., Hwang C.S. The fundamentals and applications of ferroelectric HfO2. Nature Reviews Materials, 2022, vol. 7, pp. 653–669.

Частотно-селективное демультиплексирование спиновых волн в крестообразной ЖИГ-структуре с кольцевым микрорезонатором

***Манышева А.А.*[1], *Яснев Н.Ю.*[1], *Садовников А.В.*[1]**

e-mail: aamsgmaam2006@gmail.com
[1]*ФГБОУ ВО «Саратовский государственный университет», Саратов, Россия*

Управление распространением спиновых волн (СВ) в структурированных магнитных средах представляет собой фундаментальную задачу современной магноники и физики магнитных явлений. Ключевым материалом для реализации волноводных систем выступает железо-иттриевый гранат (ЖИГ), обладающий минимальным коэффициентом затухания и высокой однородностью магнитных параметров [1, 2]. Интеграция резонансных элементов, таких как кольцевые микрорезонаторы, в волноводные топологии позволяет манипулировать фазой и амплитудой магнитных возбуждений за счет интерференции мод.

Актуальным направлением исследований является разработка конфигурируемых структур, способных осуществлять пространственную маршрутизацию сигналов без преобразования энергии в электрический ток. Наличие нескольких каналов распространения и возможность управления дисперсионными характеристиками внешним магнитным полем открывают перспективы для создания функциональных элементов на основе СВ (фильтров, мультиплексоров). Целью данной работы является численное исследование механизмов частотно-селективного демультиплексирования в системе ортогональных ЖИГ-волноводов с интегрированным кольцевым резонатором.

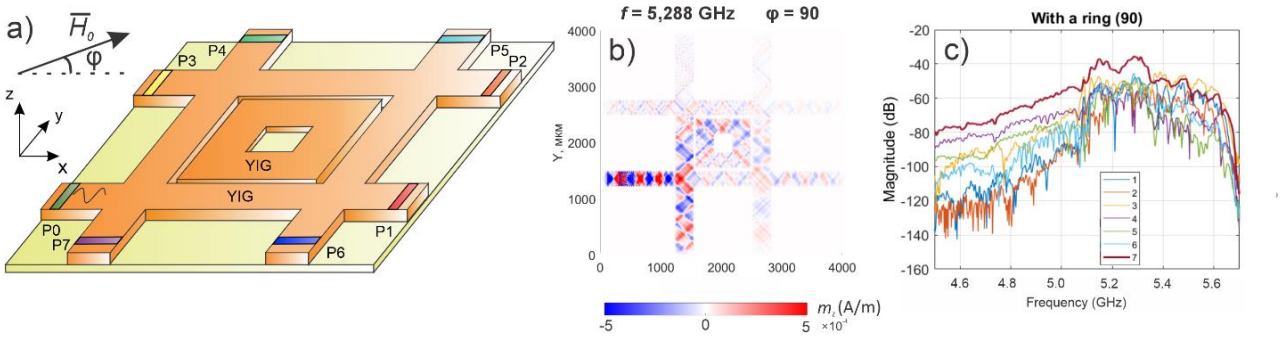


Рис. 1. (a) Схема структуры с кольцевым микрорезонатором; (b) Карта распределения фазы колебаний намагниченности при частоте f = 5.288 GHz, внешнем поле H_0 = 1.2 kOe , направленном вдоль оси Y, и возбуждении в терминале P_0; (c) Амплитудно-частотные характеристики (АЧХ) на выходах P_1 – P_7 при том же значении магнитного поля.

Объектом исследования выступила магнитная пленка ЖИГ крестообразной топологии (рис. 1a). Структура включает квадратный кольцевой резонатор со стороной 900 мкм и четыре ортогональных волновода (ширина w = 300 мкм, длина l = 4000 мкм). Толщина пленки составляла d = 10 мкм.

Моделирование динамики намагниченности проводилось в пакете MuMax3 путем решения уравнения Ландау-Лифшица-Гилберта (ЛЛГ):

$$\frac{\partial \boldsymbol{m}}{\partial t} = -\gamma\mu_0 \boldsymbol{m} \times \boldsymbol{H_{ef}} + \alpha\left[\boldsymbol{m} \times \frac{\partial \boldsymbol{m}}{\partial t}\right]$$

где m вектор намагниченности, $\gamma = 2.21 \cdot 10^5$ м/(А·с) — гиромагнитное отношение, $\alpha = 10^{-4}$ — параметр затухания, $\boldsymbol{H_{eff}}$ — эффективное поле. Для исключения отражений от границ расчетной области использовались слои с градиентным увеличением параметра затухания. Параметры материала соответствовали эпитаксиальным пленкам ЖИГ: намагниченность

M_s = 139 кА/м [3]. Внешнее магнитное поле $\boldsymbol{H_0}$ = 1.2 кЭ было ориентировано в плоскости пленки.

Функциональность структуры исследовалась путем варьирования частоты входного сигнала f и угла ориентации внешнего магнитного поля φ. Возбуждение СВ осуществлялось локальным переменным полем в порту P_0.

На рис. 1c представлены амплитудно-частотные характеристики (АЧХ), полученные на выходах $P_1 – P_7$. Анализ спектров выявил наличие узких резонансных пиков, соответствующих собственным модам кольцевого резонатора. В рабочем диапазоне 4.5 – 5.7 ГГц наблюдается управляемая асимметрия в распределении амплитуды СВ. При φ = 75° и f = 5.265 ГГц основная мощность передается в канал P_4, а при φ = 90° и f = 5.288 ГГц сигнал преимущественно направляется в каналы P_3 и P_7. Карта распределения фазы прецессии намагниченности (m_z) для случая φ = 90° (рис. 1b) демонстрирует формирование бегущей волны в резонаторе. Механизм маршрутизации обусловлен интерференцией встречных волн в кольце, фазовый сдвиг между которыми контролируется углом поля φ и частотой f.

Важной особенностью структуры является способность кольцевого резонатора поддерживать устойчивые моды. На разных частотах в нем возбуждаются бегущие моды (по или против часовой стрелки) или стоячие волны [4, 5]. Это позволяет использовать резонатор как элемент буферизации сигнала, сохраняющий информацию в частотной области, что совместимо с концепцией обработки информации в памяти (Processing-in-Memory).

Продемонстрирована возможность реализации частотно-селективного демультиплексирования спин-волновых сигналов в системе ортогональных ЖИГ-волноводов. Показано, что вариация ориентации магнитного поля и частоты возбуждения позволяет гибко управлять маршрутизацией сигналов за счет резонансных свойств кольцевого элемента. Предложенная структура перспективна для создания функциональных магнонных устройств, интегрируемых в многослойные топологии.

Финансирование: работа выполнена за счет гранта Российского научного фонда (проект № 23-79-30027).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Flebus B. et al. The 2024 magnonics roadmap. Journal of Physics: Condensed Matter, 2024, vol. 36, № 36, p. 363501.

2. Barman A. et al. The 2021 magnonics roadmap. Journal of Physics: Condensed Matter, 2021, vol. 33, № 41, p. 413001.

3. Гуревич А.Г., Мелков Г.А.Магнитные колебания и волны. Москва: Наука, 1994.464 с.

4. Wang Q., Hamadeh A., Verba R., Lomakin V., Mohseni M., Hillebrands B., Chumak A. V., Pirro P. A nonlinear magnonic nano-ring resonator. npj Computational Materials, 2020, vol. 6, № 1, p. 192.

5. Odintsov S. A., Sheshukova S. E., Nikitov S. A., Sadovnikov A. V. Lateral and vertical spin-wave transport in a multimode magnonic ring coupler. Physical Review Applied, 2024, vol. 22, № 1, p. 014042.

Локализованные спиновые волны в гетероструктурах на основе двухслойных пленок железо-иттриевого граната

Мартышкин А.А.[1], ***Бегинин Е.Н.***[1], ***Садовников А.В.***[1]

e-mail: aamartyshkin@gmail.com

[1]*ФГБОУ ВО «Саратовский национальный исследовательский университет им Н.Г. Чернышевского», Саратов, Россия*

Магноника является одним из приоритетных направлений современной физики конденсированного состояния, предлагающим использование спиновых волн для передачи и обработки данных с высоким энергоэффективным потенциалом [1]. Когерентность коллективных магнитных возбуждений открывает возможности для создания логических элементов микро- и наномасштаба, способных конкурировать с традиционными полупроводниковыми технологиями [2]. Особое место в этой области занимают волноводы на основе железо-иттриевого граната, характеризующиеся исключительно низким затуханием СВЧ-сигналов.

Основной задачей при создании устройств на спиновых волнах является реализация пространственно-частотного механизма управления спиновыми волнами путем изменения геометрии волноводоы. Известно, что геометрические дефекты могут создавать градиенты поля, формируя потенциальные ямы для спиновых волн [3]. Однако еще большие возможности предоставляют гетероструктуры, объединяющие материалы с разными магнитными характеристиками [4]. Многослойные конфигурации дают дополнительные инструменты для управления сигналом: варьируя толщину и ширину слоев в таких системах, можно создавать локальные неоднородности эффективного поля [5].

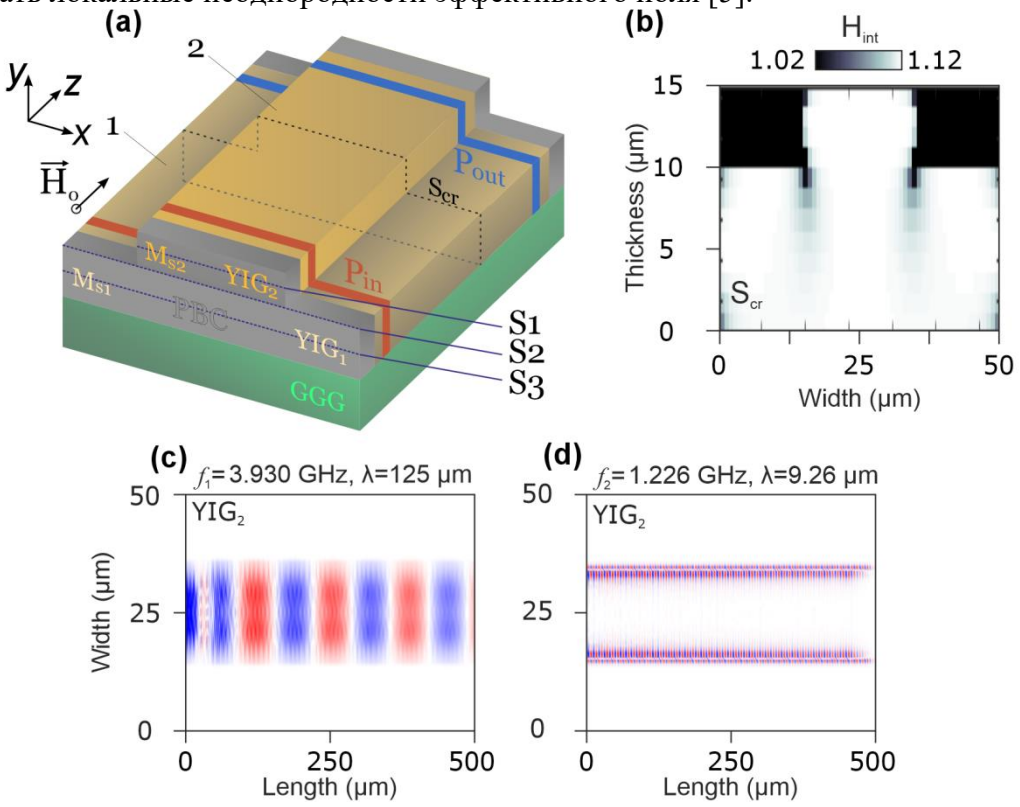


Рис. 1. Схематическое изображение двухслойной структуры (a). Распределение внутреннего поля Hint (b). Пространственные карты mz-компоненты намагниченности в слое S_1 на частоте f_1 = 3.930 ГГц (c) и f_2 = 1.226 ГГц (d).

В данной статье рассматривается гетероструктура на основе двухслойной пленки из слоёв железо-иттриевого граната с различной намагниченностью и толщинйо слоев YIG(M_{s1})/YIG(M_{s2}).

Схематическое изображение структуры из пленок ЖИГ с разными параметрами насыщения и геометрией показана на рисунке 1a. Базовый нижний слой характеризуется шириной 50 мкм, толщиной 10 мкм и намагниченностью насыщения $M_{s1} = 1{,}38\times10^5$ А/м, на котором размещен верхний слой шириной 20 мкм, толщиной 5 мкм и намагниченностью $M_{s2} = 0{,}72\times10^5$ А/м. Статическое распределение намагниченности рассчитывалось с помощью микромагнитного моделирования на основе численного решения уравнения Ландау–Лифшица–Гильберта в конфигурации Деймона–Эшбаха.

Геометрические особенности и разница магнитных параметров приводят к появлению зон существенно ослабленного внутреннего поля вблизи границ верхней пленки (рис.1b). На рисунке 1c-d представлены пространственные распределения mz-компоненты намагниченности в верхнем слое S_1. На рисунке 1c показано возбуждение спиновой волны в верхнем слое на частоте $f_1 = 3.930$ ГГц. При этом при возбуждении спин-волнового сигнала на частоте $f_2 = 1.226$ ГГц, значительно ниже частоты ферромагнитного-резонанса для конфигурации Деймона-Эшбаха, на границах волновода возбуждаются краевые локализованные спинвые волны. Физический механизм локализации связан со сложным профилем эффективного поля, возникающим вследствие суперпозиции полей размагничивания обоих слоев. В точках локальных минимумов внутреннего поля наблюдается значительный сдвиг резонансных частот. Проведенный численный эксперимент демонстриурет реализацию пространственно-частотного разделения спин-волновых сигналов в гетероструктурах. Обнаружено, что локальные минимумы поля у границ слоев обеспечивают селективное возбуждение краевых локалихованных мод спиновых волн.

Применение таких локализованных состояний создает базу для разработки компактных элементов магнонной логики, таких как частотные фильтры и демультиплексоры с низким энергопотреблением.

Финансирование: работа выполнена в рамках гранта Российского научного фонда (тема “№ 23-79-30027”).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Chumak A. V. et al. Magnon spintronics. Nature Physics, 2015, vol. 11, № 6, pp. 453–461.

2. Kruglyak V. V. et al. Magnonics. Journal of Physics D: Applied Physics, 2010, vol. 43, № 26, p. 264001.

3. Park J. P. et al. Spatially resolved dynamics of localized spin-wave modes in ferromagnetic wires. Physical Review Letters, 2002, vol. 89, № 27, p. 277201.

4. Aleksandrova Y. V. et al. Peculiarities of the spin wave spectrum in transversely confined YIG microwaveguides with inhomogeneous magnetization profile. Physics of Metals and Metallography, 2024, vol. 125, № 4, pp. 346–354.

5. Wang Q. et al. A magnonic directional coupler for integrated magnonic half-adders. Nature Electronics, 2020, vol. 3, № 12, pp. 765–774

Новый способ модификации материалов наночастицами серебра

Матульская Е.И.[1], ***Ворнакова Е.А.***[1], ***Казанцев С.О.***[1], ***Ложкомоев А.С.***[1]

e-mail: matulskaya@ispms.ru
[1]*Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск, Россия*

Одним из способов повышения эффективности различных материалов является их модификация. В связи с этим многие исследования направлены на поиск новых способов модификации полимерных, керамических, углеродных и др. материалов для повышения их функциональных характеристик.

Авторами изучен новый способ модификации материалов наночастицами серебра, которые известны своей выраженной антибактериальной [1] и фотокаталитической [2] активностью, что находит широкое применение в материалах биомедицинского назначения, катализе, технологиях очистки воды [3-5].

В работе были получены порошки серебра электрическим взрывом проволоки (ЭВП) в среде He+O_2 и Ar/20 об.% O_2. Модификацию полученными частицами Ag проводили для порошков оксидов металлов (Al_2O_3, ZnO и TiO_2), активированного угля и алюмоциркониевой керамики. Порошки оксидов металлов смешивали с частицами Ag и нагревали до 400 °C с выдержкой 4 ч. Пористые объемные материалы пропитывали суспензией наночастиц Ag, высушивали и термически обрабатывали аналогично порошковым смесям.

По данным рентгенофазового анализа порошки TiO_2/Ag, Al_2O_3/Ag, ZnO/Ag содержат фазы, соответствующие исходным порошкам и кубическую фазу Ag. Результаты рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии смесей порошков TiO_2/Ag, Al_2O_3/Ag, ZnO/Ag до и после активации показали, что для образцов TiO_2/Ag и ZnO/Ag термическая обработка приводит к появлению пиков, соответствующих Ag3d. В исходной смеси пики Ag не идентифицируется. Это обусловлено тем, что образцы исходных смесей представляют собой агломераты частиц серебра, покрытые частицами TiO_2 или ZnO. При термической обработке Ag фрагментируется и покрывает частицы TiO_2 и ZnO. В случае Al_2O_3/Ag, после термической обработки серебро распределяется преимущественно в зонах контакта частиц Al_2O_3, что приводит к ослаблению сигнала от Ag на спектрах РФЭС. Присутствие пика Ag3d в исходной смеси может быть обусловлено малым размером частиц Al_2O_3, покрывающих агломераты Ag.

После термической обработки активированного угля и алюмоциркониевой керамики с иммобилизованными частицами Ag, происходит фрагментация металла, в результате которой поверхность образцов покрывается наночастицами Ag размером от 2 до 80 нм. Данный эффект может быть использован для модификации различных материалов, устойчивых при температурах 400 °C и выше, с целью создания фотокаталитических систем для очистки воды и воздуха, для придания материалам антибактериальных свойств.

Финансирование: работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (грант № 25-19-00598), https://rscf.ru/project/25-19-00598.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Ali Sh., Bahadur A., Hassan A. Optimized silver nanostructures for enhanced antibacterial potential: Recent trends and challenges in the development of metallo-antimicrobials. Chemical Engineering Journal, 2025, vol. 507, P. 160470.

2. Icon A. D. S., Shaheen M. A., Abbas A., Zaman Y., Amin H. M. A., Alam M. M. Sunlight-assisted greenly synthesised silver nanoparticles for highly selective mercury ion sensing, biomedical and photocatalytic applications. International Journal of Environmental Analytical Chemistry. 2025, vol. 105, №. 20, pp. 9414-9436.

3. Singh J., Rawat M., Kukkar D. Biogenic synthesis of silver nanoparticles and its photocatalytic applications for removal of organic pollutants in water. Journal of Industrial and Engineering Chemistry. 2019, vol. 80, pp. 247-257.

4. Radičić R., Jurov A., Zavašnik Ja. UV and solar-driven photocatalysis of organic dyes using ZnO-Ag heterojunction nanoparticles synthesized by one-step laser synthesis in water. Applied Surface Science. 2024, vol. 669, P. 160498.

5. Zhang L., Zhang H. Silver Halide-Based Nanomaterials in Biomedical Applications and Biosensing Diagnostics. Nanoscale Research Letters. 2022, vol. 17, №. 1, pp. 1-18.

Выпрямляющие контакты для перспективной наноэлектроники

***Мезенцева Ж.В*[1]*., Дорошкевич А.С.*[1,2]*, Ибрагим Махмуд*[1,3]*, Перез Энтони*[1,4]*, Б.Л. Оксенгендлер*[5]

e-mail: mzv@nf.jinr.ru
[1] *Объединенный институт ядерных исследований, Дубна, Россия*
[2] *Государственный университет «Дубна», Дубна, Россия*
[3]*Томский политехнический университет, Томск, Россия*
[4]*Воронежский государственный университет, Воронеж, Россия.*
[5]*Институт материаловедения, ташкент, Узбекистан*

Исследованы электрические свойства, вольт–амперные характеристики и импедансные кривые соединений наночастиц гидратированного диоксида циркония, стабилизированного иттрием (3YSZ). Образцы представляли собой контактирующие слои, изготовленные из порошков, отожженных при температурах 500 °C, 600 °C и 700 °C. В наноионных системах границы раздела между наночастицами с различными структурными состояниями и размерами зерен могут влиять на перенос заряда за счет изменения плотности поверхностных дефектов, поляризации на границе раздела и гидратационной структуры. Термический отжиг играет ключевую роль в определении размера зерен нанокристаллического YSZ: при более низких температурах отжига обычно образуются частицы меньшего размера с большей удельной поверхностью и большей концентрацией поверхностных дефектов, в то время как более высокие температуры отжига способствуют росту зерен и частичному снижению плотности дефектов. Следовательно, переходы, образованные между слоями, содержащими наночастицы, отожженные при различных температурах, могут создавать асимметричные межфазные среды, которые влияют на процессы переноса заряда. Во влажных условиях поверхности оксидных наночастиц покрываются гидратационными слоями, которые облегчают перенос протонов по сетям, связанным водородными связями. Таким образом, ожидается, что различия в размере зерен между наночастицами, отожженными при 500°C, 600°C и 700°C, будут влиять как на степень гидратации поверхности, так и на плотность активных центров, участвующих в переносе протонов на границе раздела.

Нанокристаллические порошки YSZ были синтезированы методом совместного осаждения в воде с последующей дегидратацией и термическим отжигом при выбранных температурах. Были сформированы слои композитных наночастиц, которые были приведены в контакт. Вольт–амперные характеристики были измерены в диапазоне напряжений от -2 В до +2 В и импедансные кривые в диапазоне частот 1 Мгц – 1 Гц в условиях контролируемой влажности 65-85%. Дополнительные измерения были проведены в атмосфере, содержащей пары H_2O и D_2O, для оценки влияния изотопного замещения на процессы переноса заряда.

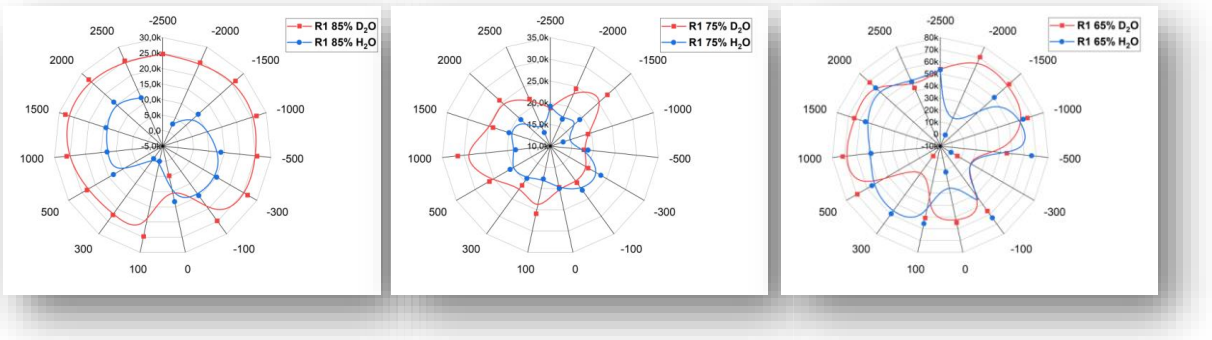


Рис.1 Сравнение электрических параметров для систем с разной влажностью в условиях гидратирования и дейтерирования

Наноматериалы на основе антител против антигенов вируса гриппа А

***Морозова О.В.*[1,2], *Исаева Е.И.*[1], *Образцова Е.А.* [2,3], *Клинов Д.В.*[2,3]**

e-mail: omorozova2010@gmail.com

[1] *ФГБУ «Национальный исследовательский центр эпидемиологии и микробиологии им. Н.Ф. Гамалеи» Минздрава России, 123098 Москва, Россия*

[2] *ФГБУ Федеральный научно-клинический центр физико-химической медицины им. Ю.М Лопухина ФМБА России, 119435 Москва, Россия*

[3] *Московский физико-технический институт, 141700 Московская область, г. Долгопрудный, Россия*

Антитела специфично и эффективно связываются с антигенами, но не способны проникать в большинство эукариотических клеток, лишенных рецепторов против константного фрагмента (Fc) иммуноглобулинов. Взаимодействие антител с внеклеточными вирионами не препятствует внутриклеточной репликации, транскрипции и трансляции вирусных геномов и поэтому не обеспечивает полной элиминации вирусов. **Цель** данной работы состояла в конструировании наноматериалов на основе моноклональных и поликлональных антител против антигенов вируса гриппа А, анализе их физико-химических и противовирусных свойств. **Методы:** Наночастицы получены из растворов антител во фтор-содержащем спирте посредством нанопреципитации. Наночастицы серебра получали восстановлением нитрата серебра в присутствии цитрата натрия, отмывали от цитратных оболочек деионизованной водой и проводили связывание с антителами. Внеклеточные везикулы выделяли из культуральных жидкостей после роста адгезивных культур клеток до конфлюэнтных монослоёв с помощью двухэтапного дифференциального центрифугирования, ресуспендировали в деионизованной воде, высушивали в тонком слое и восстанавливали посредством гидратации тонкого слоя клеточных мембран в изотоническом растворе антител в фосфатном буфере. Морфологию и размеры наноматериалов определяли с помощью сканирующей просвечивающей электронной микроскопии (scanning transmission electron microscopy (STEM)). Проникновение флуоресцентных антител в составе наноматериалов в клетки человека исследовали методом флуоресцентной микроскопии. Иммуномодулирующие свойства наноматериалов анализировали по экспрессии генов интерферонов методами обратной транскрипции с последующей ПЦР с гибридизационно-флуоресцентной детекцией продуктов в реальном времени и иммуноферментного анализа. Противовирусные свойства полученных наноматериалов, содержащих антитела к антигенам вируса гриппа А, изучали в реакциях нейтрализации, торможении гемагглютинации, при помощи иммуноферментного анализа и при титровании жизнеспособного вируса в пермиссивных культурах клеток. **Результаты:** Показано, что неспецифический эндоцитоз наночастиц из противовирусных антител приводит к транскрипции РНК интерферонов (ИФН) I и III типов при отсутствии ИФН гамма, что обеспечивает частичное ингибирование вирусной инфекции через 24 ч. Напротив, композитные наноматериалы на основе наночастиц серебра с оболочками из противовирусных антител токсичны для клеток и обладают иммуносупрессивными свойствами, вследствие чего не являются перспективными противовирусными препаратами. Нагруженные антителами внеклеточные везикулы проникают в клетки посредством слияния мембран (membrane fusion), способны ускользать от попадания в эндосомы и лизосомы с биодеградацией. Поэтому экспрессия генов ИФН I и II типов не выявлена. При добавлении гетерологичных внеклеточных везикул, выделенных из кондиционных культуральных сред после культивирования других культур клеток, детектировали РНК и белок ИФН лямбда. Антитела в составе композитных наноматериалов взаимодействовали с антигенами вируса гриппа А, но не обеспечивали полной защиты от внутриклеточной инфекции при добавлении за 24 ч до или после инфекции вирусом гриппа А H3N2 и H1N1. Исследования проведены при финансовой поддержке Российского научного фонда (РНФ) грант № 25-15-00246.

Формирование массива мемристоров Ti/MoS_2/Si на подложке высоколегированного кремния

Мотовило Т.А.[1], ***Ильин А.С.***[1]

e-mail: tmotovilo@inbox.ru

[1]*Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, физический факультет, Москва, Россия*

Традиционные кремниевые технологии приближаются к своим физическим пределам, что стимулирует поиск новых архитектур и материалов для нейроморфных вычислительных систем (НВС) [1]. Мемристоры на основе двумерных дихалькогенидов переходных металлов рассматриваются как один из наиболее перспективных вариантов для создания синаптических весов. Дисульфид молибдена (MoS_2) обладает уникальным сочетанием атомарной толщины, высокой подвижности носителей и стабильности, что делает его перспективным материалом для мемристивных применений [2]. Целью данной работы является разработка и оптимизация методики получения двумерных мемристивных структур на основе MoS_2, их исследование и оценка перспектив практического применения в НВС.

Активный слой дисульфида молибдена был синтезирован методом химического осаждения из газовой фазы (CVD) на подложке из высоколегированного кремния с удельным сопротивлением 0,01 Ом·см. Синтез проводили термическим испарением порошков MoO_3 и S в заданном мольном соотношении. Исследование структурных и морфологических характеристик полученных пленок проводилось с использованием сканирующей электронной микроскопии (СЭМ), спектроскопии комбинационного рассеяния света (КРС) и атомно-силовой микроскопии (АСМ). Элементный состав и распределение элементов по поверхности образцов были получены методом EDX-картирования. Для исследования механизмов резистивного переключения были проанализированы типичные вольт-амперные характеристики (ВАХ) структуры Ti/MoS_2/Si, полученные при циклировании напряжения в диапазоне от -5 до +5 В. В ходе измерений ток был ограничен на уровне 0.5 мА.

Спектроскопия комбинационного рассеяния (λ = 633 нм) подтвердила формирование кристаллической фазы MoS_2. Помимо характеристических колебательных мод E^2_{g1} (382 $см^{-1}$) и A_{1g} (407 $см^{-1}$), в спектрах зарегистрированы дополнительные пики при ~365 $см^{-1}$, ~492 $см^{-1}$. Их происхождение, вероятно, связано с присутствием остаточных оксидных фаз (MoO_x) либо с дефектностью и механическими напряжениями в пленке. Данные EDX-картирования продемонстрировали равномерное распределение молибдена и серы по поверхности образцов без заметных примесей. На ВАХ (рис. 1) структурах Ti/MoS_2/Si обнаружено биполярное резистивное переключение.

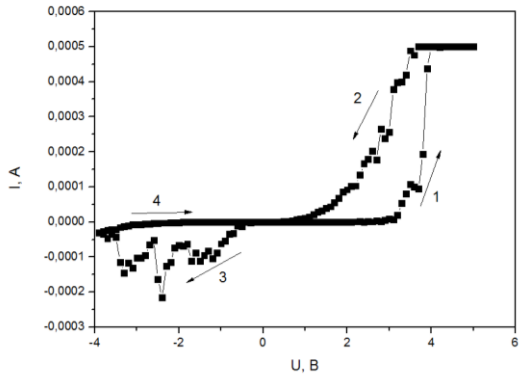


Рис. 1. Вольт-амперная характеристика структуры Ti/MoS_2/Si.

Таким образом, полученные результаты подтверждают перспективность использования синтезированных пленок MoS_2 в качестве активного слоя мемристивных устройств для нейроморфных вычислений.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Furber S. Large-scale neuromorphic computing systems. Journal of Neural Engineering, 2016, vol. 13, № 5, p. 051001.

2. Wells R. A., Robertson A. W. Molybdenum disulfide memristors for next generation memory and neuromorphic computing: Progress and prospects. Advanced Electronic Materials, 2024, vol. 10, № 10, p. 2400121

Влияние марганца на структуру и свойства металлоуглеродных нанокомпозитов на основе цеолитоподобных каркасов ZIF-67

***Муратов Д.Г.*[1], *Кожитов Л.В.*[1], *Зорин А.В.*[1]**

e-mail: muratov@yandex.ru
[1]*НИТУ МИСИС, Москва, Россия*

Высокоэффективные пористые углеродные материалы с контролируемой структурой и высокой удельной поверхностью являются ключевым компонентом гибридных суперконденсаторов [1]. Металлорганические каркасы на основе цеолитных имидазолатов (ZIF), в частности ZIF-67, выступают перспективными прекурсорами благодаря удельной поверхности 1200–1800 м²/г, N-содержащим лигандам и каталитически активным центрам Co^{2+}. Биметаллические системы Co-Mn-ZIF позволяют варьировать фазовый состав нанокомпозитов, однако интерпретация КРС-спектров пиролизованных МОК сопряжена с существенными методологическими трудностями: классический двухкомпонентный подход (D/G-полосы) не учитывает многофазную природу материала, присутствие оксидных нанофаз и остаточных МОК-фрагментов, что приводит к противоречивым результатам [2,3].

Целью настоящей работы является разработка адаптированной схемы деконволюции КРС-спектров МОК-производных нанокомпозитов, позволяющей согласовать данные КРС, РФА и СЭМ/EDS, а также установить влияние температуры пиролиза на структуру и электрохимические свойства Co(90%)-Mn(10%)/C нанокомпозитов.

Mn-замещённые МОК со структурой ZIF-67 (Co:Mn = 90:10) синтезировали методом химического осаждения из водного раствора ($Co(NO_3)_2 \cdot 6H_2O$, $MnCl_2 \cdot 4H_2O$, 2-метилимидазол [4]; мольное соотношение 2-MeIM/H_2O/нитраты = 8/223/1). Металлоуглеродные нанокомпозиты CoMn-ZIF T получали методом ИК-пиролиза в атмосфере N_2 при температурах 500, 600 и 700 °C (скорость нагрева 50 °C/мин, выдержка 5 мин). Структуру исследовали методами КРС (Renishaw inVia, λ = 514,5 нм)[2], РФА (Дифрей-401, Cr-Kα-излучение) и СЭМ/EDS (MIRA3-LMH, Tescan, 20 кВ). Электрохимические характеристики измеряли в симметричной двухэлектродной ячейке в 6 М KOH.

СЭМ-исследования показали частичное сохранение ромбододекаэдрической морфологии исходного ZIF-67. С ростом температуры пиролиза до 700 °C морфология частиц эволюционирует от глобулярной к плоскостно-чешуйчатой, что свидетельствует об усилении карбонизации каркаса. Анализ EDS подтвердил монотонный рост содержания углерода (с 42,8 до 52,0 вес.%) при одновременном снижении концентраций Co и Mn. Максимум кислорода зафиксирован у образца при 600 °C и связан с присутствием частично восстановленного Co_3O_4.

В диапазоне КРС 130–1000 $см^{-1}$ идентифицированы полосы Co_3O_4 (~193, ~476, ~519, ~617, ~664 $см^{-1}$) и остаточные МОК-моды (~150–170 $см^{-1}$ — либрационные колебания имидазолатных колец; ~681 $см^{-1}$ — деформации цикла ZIF-67), убывающие с ростом температуры. При 700 °C Co_3O_4 полностью восстанавливается до металлического Co; марганец сохраняется в форме MnO_2.

В диапазоне 1000–1800 $см^{-1}$ предложена гибридная деконволюция, включающая полосы: T (~1065 $см^{-1}$, sp^3-C), υ(C–N) МОК (~1163–1204 $см^{-1}$), D-пик (~1320–1350 $см^{-1}$), δ(CH_3) МОК (~1381 $см^{-1}$), фуллереноподобные моды (~1430 $см^{-1}$), G_a-C аморфного углерода (~1520–1543 $см^{-1}$), G-полосу (~1600 $см^{-1}$) и D″-пик (~1622–1657 $см^{-1}$). По результатам деконволюции с ростом температуры от 500 до 700 °C соотношение I(D)/I(G) уменьшается с 1,27 до 1,15, средний размер кристаллитов графита L_a возрастает с 3,2 до 3,8 нм, а доля аморфного углерода снижается. Предложенная схема устраняет противоречия с данными РФА (появление рефлекса (002) графита), возникающие при использовании классической двухкомпонентной модели [2].

При электрохимических измерениях в симметричной ячейке (6 М KOH) максимальная удельная ёмкость 336 Ф/г достигнута для образца CoMn-ZIF 600. Это обусловлено синергией

двойнослойного накопления заряда на высокопористой N-допированной углеродной матрице и псевдоёмкости за счёт редокс-процессов на наночастицах Co/CoO_x и MnO_2. При 700 °C инкапсуляция частиц Co в углеродных оболочках ограничивает псевдоёмкость; при 500 °C недостаточная проводимость матрицы ведёт к потерям.

Таким образом, впервые предложена адаптированная схема деконволюции КРС-спектров для МОК-производных материалов с инкапсулированными металлическими и оксидными наночастицами, обеспечивающая согласованную интерпретацию данных КРС, РФА и СЭМ/EDS. Установлено, что оптимальная температура пиролиза Mn-замещённого ZIF-67 составляет 600 °C. Результаты подтверждают высокую перспективность ZIF-67-производных нанокомпозитов как электродных материалов для устройств накопления энергии.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Sun Y. et al. Large-Scale Synthesis of Hierarchical Porous MOF Particles for High Areal Capacitance Supercapacitors. Nanomaterials. 2023. Vol. 13. P. 1691.

2. Ferrari A., Robertson J. Interpretation of Raman spectra of disordered and amorphous carbon. Physical Review B. 2000. Vol. 61. P. 14095–14107.

3. Mofokeng T.P. et al. Defect-engineered nanostructured Ni/MOF-derived carbons for an efficient aqueous battery-type energy storage device. ACS Omega. 2020. Vol. 5. P. 20461–20472.

4. Muratov D.G. et al. Electrochemical properties of CoMn/C based on zeolite-like metal-organic frameworks. Modern Electronic Materials. 2025. Vol. 11. P. 163–174.

Моделирование спектра металл-усиленной флуоресценции самоподобных коллоидных наноантенн для детекции одиночных молекул

Зарьков С.В.[1,2]***, Якунин А.Н.***[1]***, Аветисян Ю.А.***[1]***, Акчурин Г.Г.,***[1,3]*** Тучин В.В.***[1,3,4]
e-mail: szarcov@gmail.com
[1]*Институт проблем точной механики и управления ФГБУН ФИЦ СНЦ РАН, Саратов, Россия*
[2]*Институт биохимии и физиологи растений и микроорганизмов ФГБУН ФИЦ СНЦ РАН, Саратов, Россия*
[3]*ФГБОУ ВО «Саратовский национальный исследовательский государственный университет имени Н.Г. Чернышевского», Саратов, Россия*
[4]*ФГАОУ ВО «Национальный исследовательский Томский государственный университет», Томск, Россия*

В рамках предложенной улучшенной модели [1] металл-усиленной флуоресценции (МУФ), учитывающей спектральные свойства флуорофора TagRFP [2] проведен расчет спектров флуоресценции самоподобных коллоидных наноантенн (СКН) [3], используемых для детекции одиночных молекул.

Данная модель отличается от традиционных тем, что введены в рассмотрение понятия эффективных параметров, учитывающих спектральную чувствительность на этапах возбуждения и эмиссии путем введения номированных спектральных функций эмиссии (I_{em}) и возбуждения (I_{ex}) молекул флуорофора. Характерная особенность таких эффективных параметров — их спектральная локализация, они стремятся к нулю вне зоны чувствительности флуорофора. И это более корректно описывает физику процессов МУФ.

Эффективный квантовый выход и эффективный коэффициент усиления флуоресценции в рамках улучшенной модели МУФ определяется как:

$$Y_{eff} = \frac{\Gamma_{rad,eff}}{\Gamma_{rad,eff} + \Gamma_{nr,eff} + 1/Y_0 - 1},$$

$$K_{flu,eff} = \xi_{eff} Y_{eff}$$

$\xi_{eff}=I_{ex}\xi$ — эффективный коэффициент усиления возбуждения, $\Gamma_{rad,eff}= \Gamma_{rad} I_{em}$, $\Gamma_{nr,eff}= \Gamma_{nr} I_{em}$ — эффективные скорости радиационых и нерадиационных потерь, соответственно, Y_0 — собственный квантовый выход флуоресцентной молекулы.

Для моделирования использовалось решение электродинамической задачи с использованием пакета Comsol Multiphysics 5.1 (модуль «Wave Optics»). Получены численные результаты для СКН из золота и серебра. Из сравнения результатов моделирования (Рис 1а,в) следует: спектральные карты радиационных потерь имеют приблизительно одинаковый характер — один пик в одном и том же диапазоне ($\lambda_{rad,max}$=575 нм). С нерадиационными потерями — всё иначе. В случае золотой СКН наблюдается совпадение спектрального положения максимумов радиационных и нерадиационных потерь (Рис. 1б), тогда как в случае серебряной СКН появляются два разнесенных по диапазону пика (Рис 1г). Как результат, мы получаем различные спектры $K_{flu,eff}$. Для серебряной СКН значение максимума $K_{flu,eff}$ примерно в 20 раз выше чем для золотой. Также наблюдается существенная зависимость спектральных зависимостей от значения собственного квантового выхода молекулы (Рис 2). Существенно меняется область спектральной и пространственной (от величины зазора – Δ) локализации $K_{flu,eff}$. При учете собственного квантового выхода флуорофора (Y_0=0,48) наблюдается сдвиг максимума в область максимума спектра эмиссии флуорофора, тогда как при Y_0=1 имеем «размазанный» по диапазону спектр, обусловленный спектральными свойствами плазмонной наноструктуры (СКН). В рамках предложенной модели получены характерные спектры

МУФ, которые в полной мере учитывают спектральные свойства идентифицируемых молекул флуорофора TagRFP.Развитая модель позволила выявить существенную зависимость спектра МУФ от значения собственного квантового выхода молекулы.

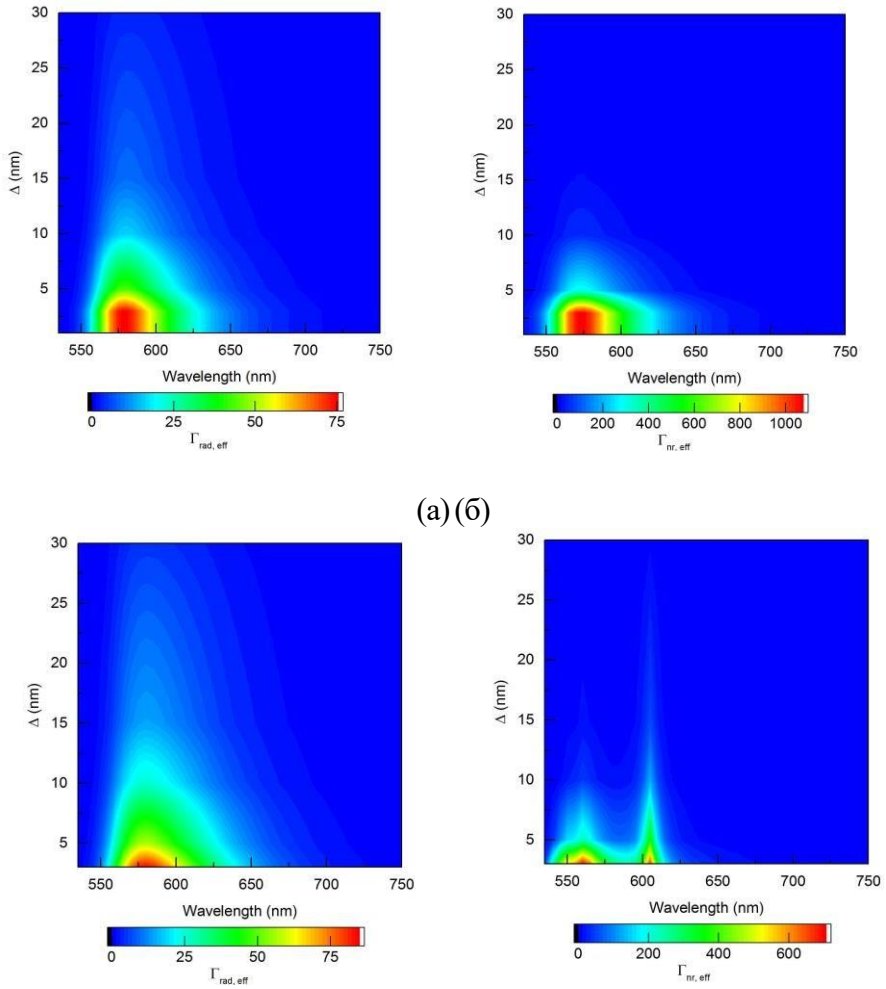
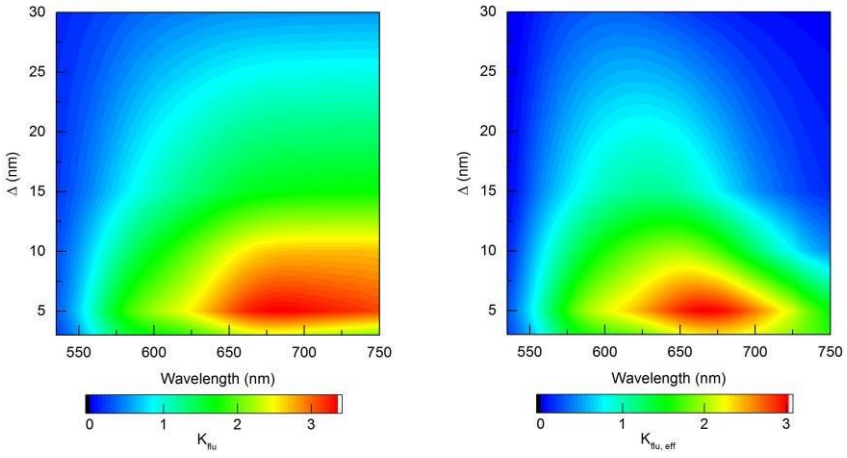
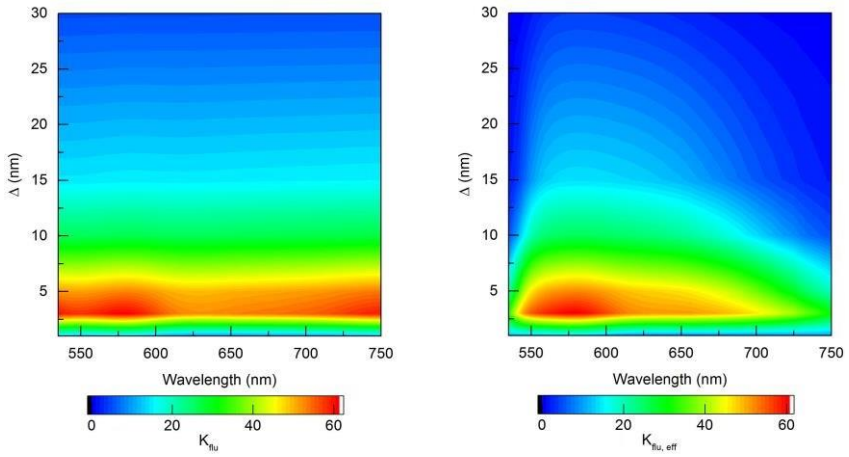


Рис. 1. Карты распределения эффективных скоростей радиационных (а,в) и нерадиационных (б,г) потерь вблизи вершины золотой (а,б) и серебряной колоидных наноантенн (в,г).





(в)(г)

Рис. 2. Карты распределения коэффициента усиления флуоресценции в приближении Y_0=1 (а, в) и Y_0=0.48 (б,г) вблизи вершины золотой (а,б) и серебряной колоидных наноантенн (в,г).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Yakunin A. N., Zarkov S. V., Avetisyan Yu. A., Akchurin G. G., Tuchin V. V. Metal-enhanced fluorescence of nanocomplexes. Materials, 2026, vol. 19, № 6, p. 1258. DOI: 10.3390/ma19061258.

2. FPbase. Available online: (accessed on 18 February 2026).

3. Hoppener Ch., Lapin Z., Bharadwaj P., Novotny L. Self-similar colloidal antennas for cascaded field. Phys. Rev. Lett., 2012, vol. 109, art. 017402.

Термоиндуцированная кристаллизация SiOx как механизм оптимизации резистивного переключения

Гусев Д.В.[1], Брук Э.Л.[1], Кукушкин А.О.[1]

e-mail: gusevdv@my.msu.ru
[1]МГУ им. М. В. Ломоносова, физический факультет, Москва, Россия

В последние десятилетия наблюдается интенсивный рост интереса к мемристорным устройствам как к перспективной элементной базе для нейроморфных вычислительных систем, способных преодолеть фундаментальные ограничения классической фон-неймановской архитектуры, связанные с раздельным хранением и обработкой данных, а также обеспечить энергоэффективную реализацию алгоритмов искусственного интеллекта за счет совмещения функций памяти и вычислений в одной ячейке [1,2]. Мемристоры на основе нестехиометрического оксида кремния (SiO_X) привлекают повышенное внимание благодаря совместимости с кремниевой технологией и перспективам создания нейроморфных вычислительных систем [3]. Однако устройства на основе SiOx зачастую демонстрируют нестабильность параметров переключения, а механизмы формирования и разрушения проводящих филаментов в активном слое остаются недостаточно изученными. При этом ключевым фактором, определяющим параметры переключения, является структурное состояние активного слоя, которое может быть модифицировано термической обработкой [4]. В данной работе исследовано влияние отжига образцов при 1100°C на вольт-амперные характеристики мемристорных структур $Si/SiO_X/Ti$.

Были исследованы два типа образцов: неотожженный и отожженный при температуре 1100°C в инертной атмосфере. Методами просвечивающей электронной микроскопии (ПЭМ) установлено, что исходная структура характеризуется четкой границей между кристаллической кремниевой подложкой и аморфной пленкой SiO_X (рис. 1а). В отличие от нее, в отожженном образце наблюдается фазовое разделение: в объеме матрицы SiO_2 формируются темные включения с характерным размером около 5 нм (рис. 1б). Анализ микродифракции от данных включений выявил наличие рефлексов, соответствующих кристаллической фазе, что позволило идентифицировать их как нанокристаллы кремния.

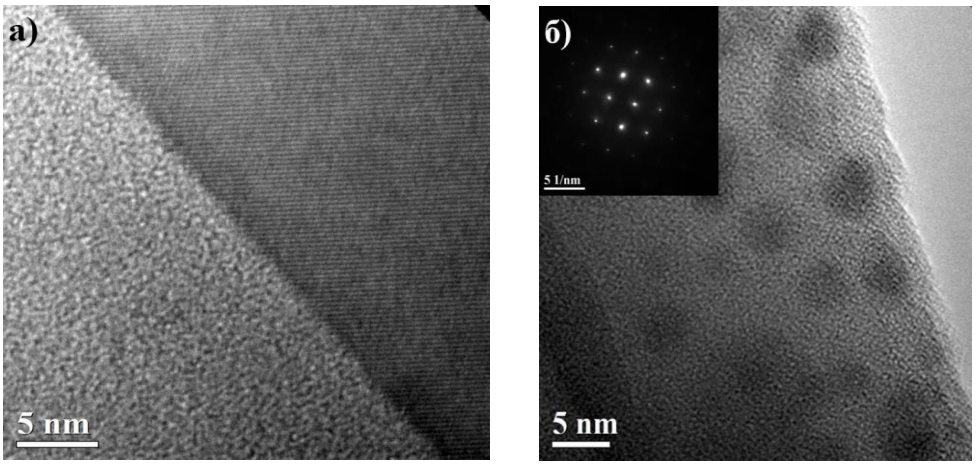


Рис. 1. Фотографии просвечивающей электронной микроскопии (а) до отжига и (б) после отжига

Вольт-амперные характеристики обоих типов образцов демонстрируют биполярное переключение. Неотожженный образец изначально находится в высокоомном состоянии ROFF и демонстрирует переключение с напряжениями записи V_{SET} ≈ +8.25 В и считывания V_{RESET} ≈-8 В, при этом отношение сопротивлений R_{ON}/R_{OFF} составляет приблизительно 6.5.

Отжиг при 1100°C приводит к существенному изменению электрофизических свойств: в отличие от неотожженного аналога, отожженный образец исходно находится в низкоомном состоянии RON, и для получения стабильных петель гистерезиса требуется приложить отрицательное напряжение, в результате чего структура переключается в состояние R_{OFF} и далее работает устойчиво. При этом напряжения записи и считывания снижаются до V_{SET} ≈+7.4 В и V_{RESET} ≈ -4.3 В, а отношение R_{ON}/R_{OFF} возрастает приблизительно до 14, что более чем вдвое превышает значение для неотожженного образца.

Полученные результаты позволяют предположить, что высокотемпературный отжиг индуцирует структурные изменения в слое SiO_X, вероятно связанные с усилением фазового разделения и формированием кластеров кремния, что приводит к увеличению контраста между проводящим и изолирующим состояниями. Снижение напряжений записи и считывания и необходимость формовки для отожженного образца могут объясняться частичным термическим формированием проводящих каналов, требующих контролируемого размыкания электрическим полем. Таким образом, высокотемпературный отжиг является эффективным способом настройки и улучшения параметров мемристоров на основе SiO_X.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Ielmini D., Waser R. Resistive Switching: From Fundamentals of Nanoionic Redox Processes to Memristive Device Applications. Wiley VCH Verlag GmbH & Co. KGaA, 2016.

2. Valov I. Redox-Based Resistive Switching Memories (ReRAMs): Electrochemical Systems at the Atomic Scale. ChemElectroChem, 2014, vol. 1, №. 1, pp. 26-36.

3. The Effect of Substrate Doping types on the Switching Behaviors of Ultrathin SiOx Memristors. physica status solidi (RRL) - Rapid Research Letters, 2025, vol. 19, №. 8, P. 2500385.

4. Forsh P.A., Gavrilyuk A.S., Forsh E.A. et al. Conductivity of structures with silicon nanocrystals in oxide matrix. Nanotechnol Russia, 2011, vol. 6, №. 3, pp. 125-129

Исследование импедансной спектроскопии в тонких пленках углеродных квантовых точек

Ненашев Г.В.[1], ***Алешин А.Н.***[1]

e-mail: virison95@gmail.com

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

Углеродные квантовые точки (УКТ) представляют собой перспективный класс наноматериалов, обладающих низкой токсичностью, высокой биосовместимостью и уникальными оптическими и электрическими свойствами, что открывает широкие возможности их применения в биомедицине, солнечной энергетике, сенсорах и оптоэлектронных устройствах [1-3]. Несмотря на активные исследования оптических характеристик УКТ, их транспортные свойства, механизмы проводимости и особенно шумовые характеристики изучены недостаточно. Целью настоящей работы является комплексное исследование вольт-амперных характеристик и импедансных свойств в тонких пленках УКТ, синтезированных из L-лизина.

УКТ были получены одностадийным методом микроволнового пиролиза L-лизина. Средний размер частиц по данным динамического светорассеяния составил около 4 нм (распределение размеров от 1 до 30 нм). Тонкие пленки УКТ наносили на стеклянные подложки с электродами из оксида индия и олова (ITO) с расстоянием между электродами 200 мкм. Вольт-амперные характеристики измеряли в планарной геометрии при комнатной температуре в темноте с использованием пикоамперметра Keithley 6487. Импедансные измерения проводили с помощью анализатора Elins Z-500PX в диапазоне частот 10 Гц – 0,5 МГц при смещениях 0–1 В.

По результатам измерений вольт-амперные характеристики пленок УКТ носят омический характер ($I \sim V^n$, $n \approx 1$) в диапазоне напряжений от –4 В до +4 В (рис. 1). Графики Коула-Коула имеют дугообразную форму и хорошо описываются эквивалентной электрической схемой, состоящей из последовательного сопротивления R_1, рекомбинационного сопротивления R_2 и геометрической емкости C_1, что обусловлено накоплением заряда, сопротивлением переноса и дополнительными межфазными состояниями. Характеристики остаются стабильными при изменении смещения. Максимальная мнимая часть импеданса составляет $4.7*10^4$ Ом, что свидетельствует о значительной емкостной составляющей в системе. Это может быть связано с наличием межфазных границ и зарядовых ловушек в структуре УКТ, что обусловлено их нанометровыми размерами. Отсутствие изменений в графике Коула-Коула при изменении смещения от 0 до 1V с шагом 0.2V указывает на высокую стабильность материала в электрическом поле. Это означает, что УКТ на основе L-лизина обладают стабильными электрохимическими свойствами и устойчивы к смещениям напряжения. Постоянное значение действительной части импеданса $f < 5 \cdot 10^4$ Гц свидетельствует о доминировании резистивной компоненты в данном диапазоне частот. Это типично для материалов, где основное сопротивление обусловлено движением зарядов через материал, а емкостные эффекты проявляются при более высоких частотах. Экспоненциальное падение Re на высоких частотах указывает на доминирование емкостного поведения, что связано с уменьшением вклада резистивного компонента и возрастающей ролью емкостных эффектов. Это явление характерно для материалов, где переменный ток вызывает перестройку зарядовых состояний или поляризацию на межфазных границах.

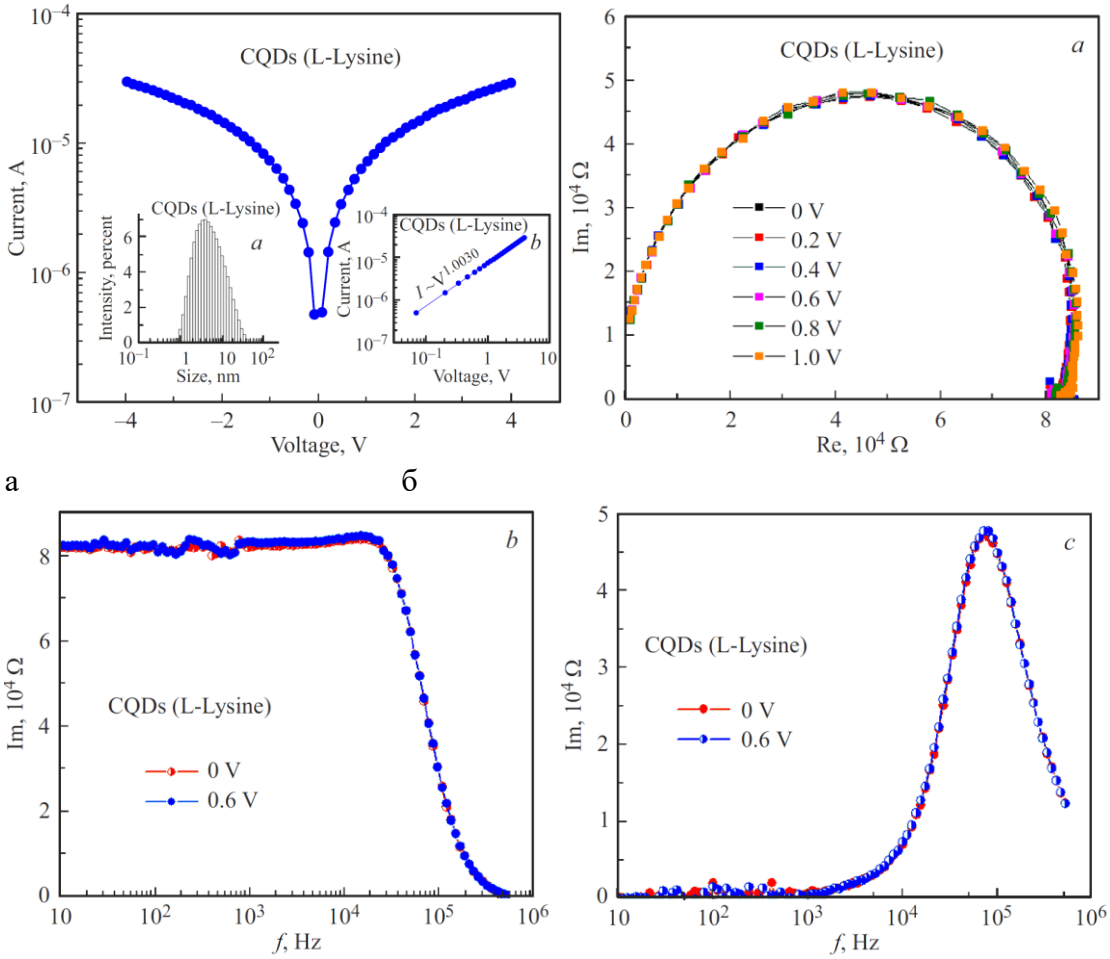


Рис. 1. ВАХ пленки УКТ на основе L-лизина. На вставках: a) распределение размеров УКТ на основе L лизина; b) ВАХ той же пленки УКТ на основе L-лизина в lg–lg масштабе (a); Импеданс характеристики пленки УКТ на основе L-лизина при приложении различного напряжения (б); Частотные зависимости действительной и мнимой частей (в); Импеданс характеристики пленки УКТ на основе L-лизина (г).

Таким образом, в настоящей работе проведено комплексное исследование транспортных и шумовых характеристик тонких пленок углеродных квантовых точек на основе L-лизина. Полученные результаты углубляют понимание механизмов переноса заряда и генерации низкочастотного шума в УКТ-пленках и позволяют прогнозировать свойства оптоэлектронных устройств на их основе.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. X. Xu, R. Ray, Y. Gu, H.J. Ploehn, L. Gearheart, K. Raker, W.A. Scrivens. Electrophoretic analysis and purification of fluorescent single-walled carbon nanotube fragments. J. Am. Chem. 2004 vol. 126, p. 12736.

2. A.R. Nallayagari, E. Sgreccia, R. Pizzoferrato, M. Cabibbo, S. Kaciulis, E. Bolli, L. Pasquini, P. Knauth, M.L. Di Vona. J. Tuneable properties of carbon quantum dots by different synthetic methods. Nanostruct. Chem. 2022 vol. 12, pp. 565-580.

3. B. Vercelli. The Role of Carbon Quantum Dots in Organic Photovoltaics: A Short Overview. Coatings, 2021, vol. 11, p. 232.

Сравнительный анализ методов эксфолиации графита

Нечушкин С.Б.[1], ***Козлов В.В.***[1]

e-mail: nechushkin.sb@misis.ru

Национальный исследовательский технологический университет «МИСИС», Институт новых материалов, Москва, Россия

В работе рассмотрены три подхода к получению графеновых структур из графита марки ЭГ: ультразвуковая жидкофазная эксфолиация с использованием УЗ-диспергатора УЗД-2-0,063/22 (УЗЖФЭ, $m_{гр}$ = 0,3 г, $C_{гр}$ = 0,8 масс. %, t = 60 мин, $C_{ПАН}$ = 0,2 масс. %, $V_{ДМФА}$ = 40 мл, P = 63 Вт, f = 22±1,65 кГц), механическая обработка в чашечной вибрационной мельнице МВ-4 (20–30 мин, 1300 об./мин, P = 4 кВт) в присутствии полиакрилонитрила (ПАН), а также химическая эксфолиация методом Хаммера на основе системы $KMnO_4/H_2SO_4$ и с использованием $K_2Cr_2O_7$.

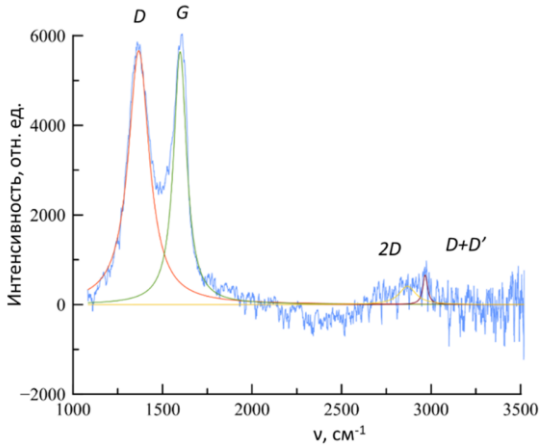


Рис.1. КР-спектр оксида графена, полученного методом Хаммера

Структурные особенности оксида графена (ОГ), синтезированного методом Хаммера, изучали методом КР-спектроскопии на приборе EnSpectr R532. На спектре (рис. 1) регистрируются характерные полосы D (1367 $см^{-1}$), G (1598 $см^{-1}$), а также 2D (2868 $см^{-1}$) и D+D′ (2967 $см^{-1}$). Соотношения интенсивностей пиков $I_{D/G}$ = 1, $I_{2D/G}$ = 0,07 и $I_{(D+D')/G}$ = 0,12 соответствуют структуре ОГ; D-полоса указывает на наличие дефектов, G-полоса отражает степень графитизации, а интенсивность 2D-полосы связана с числом слоёв в графеновой структуре.

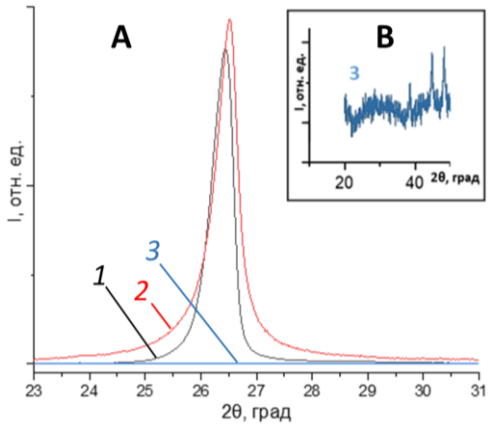


Рис. 2. **A** РФА образцов после различных методов эксфолиации: 1 – УЗ-обработка (60 мин), 2 – механическое измельчение в (20 мин) с ПАН, 3 – метод Хаммера; **B** КР- РФА ОГ, полученного методом Хаммера.

Рентгенофазовый анализ проводили на дифрактометре Bruker D8 Advance (CuKα-излучение). Сопоставление дифрактограмм (рис. 2 А) показывает различия в степени расслоения графита после УЗЖФЭ, механической обработки с ПАН и метода Хаммера. Для образца, полученного методом Хаммера, на дифрактограмме (рис. 2 В) отсутствует характеристический пик графита (002), что свидетельствует об эффективной эксфолиации до ОГ.

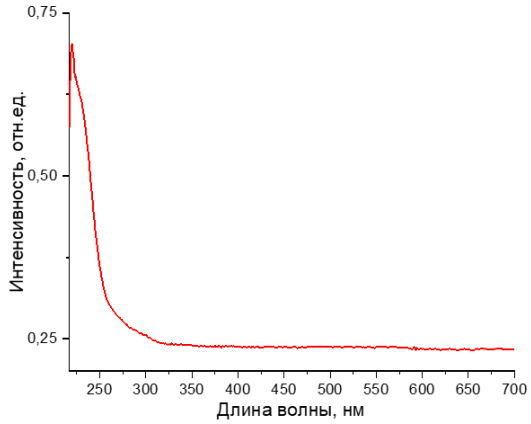


Рис.3. УФ-спектр оксида графена, полученного методом Хаммера

Данные УФ-спектроскопии водного коричневого раствора ОГ (рис. 3) демонстрируют выраженную полосу поглощения в области 230–235 нм, соответствующую π → π*-переходу, что является типичным признаком оксида графена.

При использовании методов УЗЖФЭ и ЧВМ с добавлением ПАН зафиксировано увеличение межслоевого расстояния от 3,376 до 3,609 Å, что указывает на более высокую эффективность механической эксфолиации по сравнению с ультразвуковой, вероятно вследствие поверхностно-активной роли ПАН. Сравнительный анализ трёх методов показал, что образец, синтезированный методом Хаммера, демонстрирует наиболее глубокую эксфолиацию графита, а различия между УЗЖФЭ и ЧВМ подтверждаются энергетическими оценками: энергия эксфолиации возрастает от 9,07 до 23,08 кДж/моль при переходе от УЗЖФЭ к механической обработке.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Seol J. H., Jo I., Moore A. L. et al. Two-dimensional phonon transport in supported graphene. Science, 2010, vol. 328, pp. 213–216.

2. Atta N. F., Galal A., El-Ads E. H. Graphene — A platform for sensor and biosensor applications. In: Biosensors — Micro and Nanoscale Applications, 2015, ch. 2, pp. 37–84.

3. Mellado C., Figueroa T., Baez R. et al. Synthesis and characterization of functionalized graphene oxide nanocomposites for environmental remediation. Materials Today Chemistry, 2019, vol. 13, pp. 1–7.

4. Geim A. K., Novoselov K. S. The rise of graphene. Nature Materials, 2007, vol. 6, pp. 183–191..

Применение наноструктурированных графеновых метаповерхностей для электрического управления рассеянием терагерцового излучения

Никитин М.С [1], ***Макеева Г.С.***[2]

e-mail: radiotech@pnzgu.ru

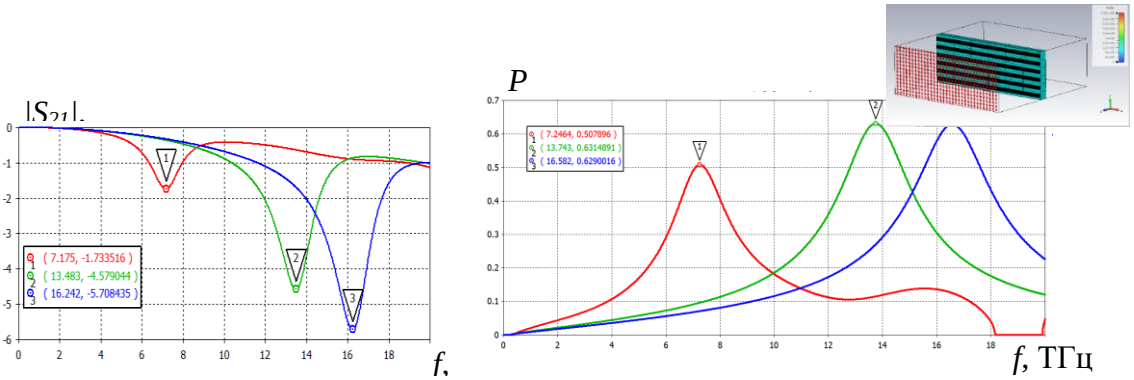
[1]*Научно-исследовательский и конструкторский институт радиоэлектронной техники, Заречный, Россия*

[2]*Пензенский государственный университет, Пенза, Россия*

Методы динамической перестройки метаповерхностей, основанные на термических и механических воздействиях, ограничены низкой скоростью переключения и малым диапазоном перестройки [1]. Комбинация метаповерхностей и графена становится платформой для электрически управляемых плазмонных устройств с высокой скоростью отклика благодаря усиленному взаимодействию графена с излучением [1]. Плазмонные эффекты также связывают с маскировкой и скрытностью с самого начала применения концепций метаматериалов для уменьшения рассеяния [2].

Целью работы является численное исследование с помощью программы CST MWS электрической управляемости эффективной поверхности рассеяния (ЭПР) RCS терагерцового (ТГц) излучения на ячейке графеновой метаповерхности при изменении уровня Ферми графена E_f.

В программе MWS CST [3] разработана модель ячейки наноструктурированной графеновой метаповерхности (период *d)* на основе 1D графеновых нанолент (ГНЛ) *(*ширина *w)* на диэлектрической подложке (толщиной *h*, ε=4) (вставка к рис. 1). Для описания границы раздела сред используем граничное условие Open (add space) [4]. С помощью программы MWS CST методом каналов Флоке [4] рассчитаны спектральные зависимости коэффициентов прохождения $|S_{21}|$ и поглощения *P* линейно-поляризованной плоской волны *p*-поляризации (вставка к рис. 1, а), нормально падающей на графеновую метаповерхность, в ТГц-диапазоне частот, результаты которого представлены на рис. 1 а, б. Параметры графена: τ = 1 пс, Т = 300 К.



а) б)

Рис. 1. Спектральные зависимости коэффициентов прохождения $|S_{21}|$ (а) и поглощения *P* (б) нормально падающей плоской волны *p*-поляризации на графеновую метаповерхность при различных значениях уровня Ферми графена E_f : 1 - E_f = 0.2 эВ, 2 - 0.7 эВ, 3 - 1 эВ; *w*=0.5 мкм, *d*=1 мкм, ε=4, *h*=1мкм

С помощью программы MWS CST, используя метод падающей волны [4], проведено моделирование диаграмм рассеяния (ДР) линейно-поляризованных плоских ТГц-волн на ячейке графеновой метаповерхности на частотах плазмонного резонанса и численное исследование ЭПР RCS [4] в зависимости от значений уровня Ферми графена E_f (0,2-1 эВ). Результаты моделирования 3D и 2D ДР ЭПР RCS ($мкм^2$) падающей плоской волны *p*-поляризации на ячейке графеновой метаповерхности на частотах f_{0res} фундаментальной моды

поверхностных плазмон-поляритонов (ППП) в 1D ГНЛ для различных значений E_f : E_f =-0.25 эВ, f_{0res} =8 ТГц и E_f = -0.7 эВ, f_{0res} =13.5 ТГц приведены на рис. 2,а и 2,б.

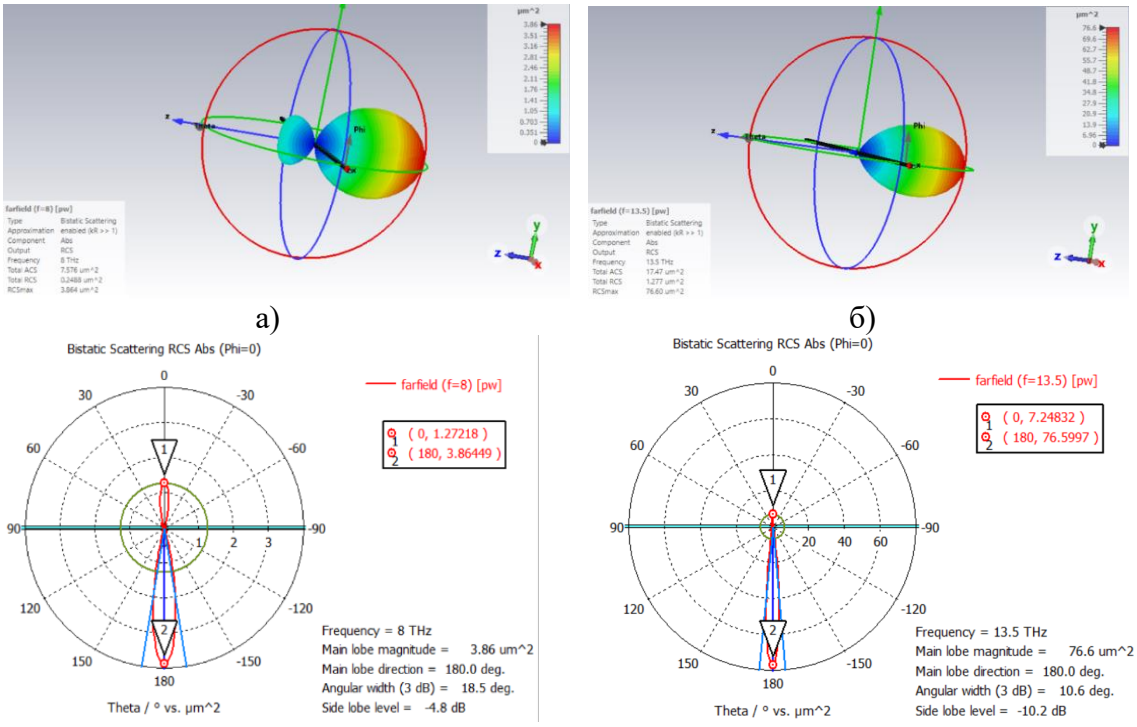


Рис.2. 3D (а, в) и 2D (φ= 0˚) (в, г) ДР ЭПР RCS ($мкм^2$) ячейки графеновой метаповерхности на частотах f_{0res} плазмонного резонанса ППП для различных значений уровня Ферми графена E_f : *а, в* - E_f =-0.25 эВ, f_{0res} =8 ТГц; *б, г* - E_f = -0.7 эВ, f_{0res} =13.5 ТГц; w=0.5 мкм, d=1 мкм, ε=4, h=1мкм

Из результатов следует, что параметр ЭПР RCS в точках сечения (φ=0˚) главного лепестка ДР равен: при E_f =-0,25 эВ в точке 1 (θ=0˚) RCS ($мкм^2$)=1.27 (отраженная волна), в точке 2 (θ=180˚) RCS ($мкм^2$)=3.86 (прошедшая волна) (рис. 2, а, в); при E_f =-0.7 эВ в точке 1 (θ=0˚) RCS ($мкм^2$)=7,24 (отраженная волна), в точке 2 (θ=180˚) RCS ($мкм^2$)=76,6 (прошедшая волна) (рис. 2, б, г).

Следовательно, при увеличении значения уровня Ферми графена ЭПР RCS ячейки графеновой метаповерхности значительно возрастает на сдвигающихся частотах резонансов ППП, при этом наблюдается существенное изменение и отличие ЭПР RCS в режимах на проход и на отражение. Это обусловлено влиянием эффекта резонансного поглощения ТГц-излучения в плазмонных графеновых наноструктурах, возрастающего при увеличении частоты плазмонного резонанса f_{0res} вследствие резкого изменения проводимости графена, проявляющегося в исследуемом интервале частот ТГц-диапазона. Таким образом, ЭПР RCS ячейки графеновой метаповерхности управляются изменением уровня Ферми графена (приложением внешнего электрического поля) в широком интервале частот ТГц-диапазона.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Li J., Yu P., Cheng H. et al. Optical polarization encoding using graphene-loaded plasmonic metasurfaces. Advanced Optical Materials, 2016, vol. 4, № 1, pp. 91–98.

2. Chen P.-Y., Soric J., Padooru Y. R. et al. Nanostructured graphene metasurface for tunable terahertz cloaking. New Journal of Physics, 2013, vol. 15, p. 123029.

3. CST Microwave Studio. Available online: (accessed on 18 May 2026).

4. Курушин А. А. Проектирование СВЧ-устройств в CST Studio Suite. Москва: ДМК Пресс, 2016. 433 с.

Управление преобразованием поляризации терагерцовых волн с помощью магнитоплазмонных графеновых метаповерхностей

Никитин М.С.[1], ***Макеева Г.С.***[2]

e-mail: radiotech@pnzgu.ru

[1]*Научно-исследовательский и конструкторский институт радиоэлектронной техники, Заречный, Россия*

[2]*Пензенский государственный университет, Пенза, Россия*

Проводимость графена можно динамически перестраивать с помощью электростатического смещения или химического легирования, а также регулировать магнитостатическим полем [1]. Благодаря гиротропному отклику графена при магнитостатическом смещении, отражатели способны манипулировать поляризацией отраженных волн (эффекты Керра) [2]. Целью работы является численное исследование с помощью программы электродинамического моделирования CST MWS [3] управляемости магнитостатическим полем преобразования поляризации терагерцового (ТГц) излучения при дифракции на магнитоплазмонных графеновых метаповерхностях.

Методом каналов Флоке [4] с помощью программы MWS CST рассчитаны зависимости от частоты S-параметров $|S_{21}|$, $|S_{11}|$ метаповерхности (период d=2 мкм) на основе 1D графеновых нанолент (ГНЛ) (w=0.5 мкм) на подложке (ε=4, h=1мкм) при дифракции нормально падающей линейно-поляризованной плоской волны p-поляризации (вставка к рис.1) для различных значений B_0 перпендикулярного магнитостатического поля в ТГц-диапазоне, представленные для $|S_{21}|$ на рис. 1. Параметры графена E_f = -0.2 эВ, τ = 0.1 пс, T = 300 K.

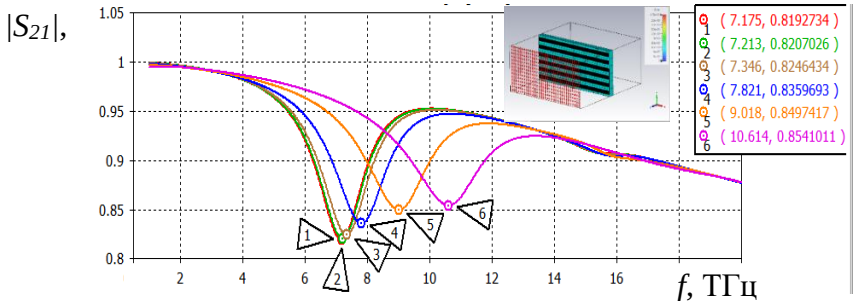
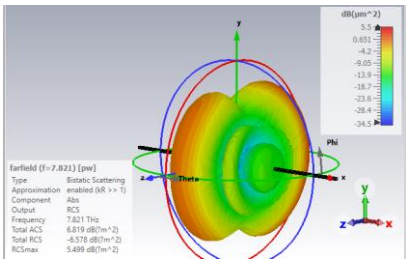
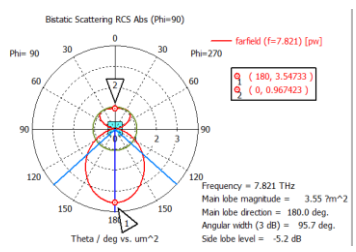


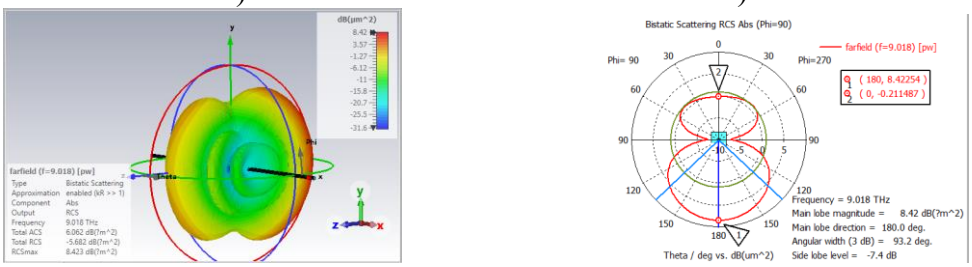
Рис. 1. Зависимости S-параметра $|S_{21}|$ магнитно-смещенной графеновой метаповерхности при дифракции линейно-поляризованной плоской волны p-поляризации для различных значений B_0: кривая 1 – B_0 = 0, 2 – 2 Тл, 3 – 4 Тл, 4 – 7 Тл, 5 – 10 Тл; на вставке – модель в MWS CST

Методом падающей волны [4] проведено моделирование диаграмм рассеяния (ДР) RCS (radar cross section) [3] линейно-поляризованной плоской волны p-поляризации на ячейке магнитоплазмонной графеновой метаповерхности для различных значений B_0. Результаты моделирования 3D и 2D ДР RCS ($мкм^2$) на частотах f_{res} магнитоплазмонных резонансов приведены для B_0=4 Тл, f_{res}=7.821 ТГц и B_0=7 Тл, f_{res}=9.018 ТГц на рис. 2 а, б, и 2 в,г, соответственно.





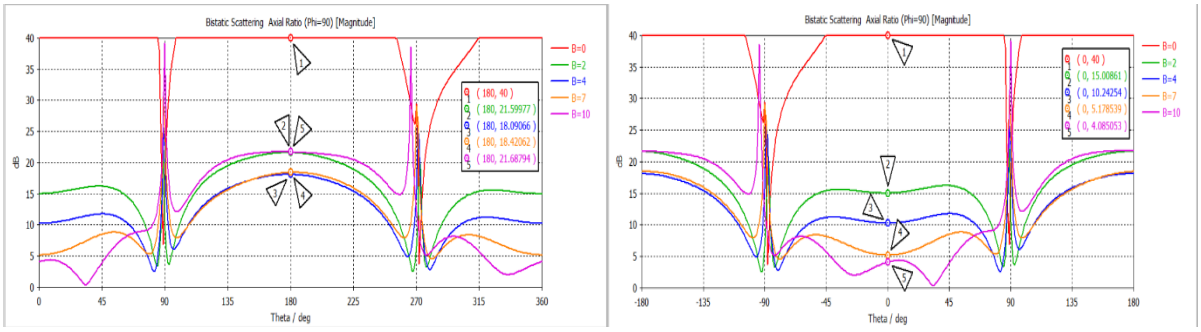
а) б)



в) г)

Рис. 2. 3D (а, в) и 2D (φ= 0˚) (б, г) ДР RCS ($мкм^2$) ячейки магнитоплазмонной графеновой метаповерхности на резонансных частотах для различных значений B_0: (а, б) B_0=4 Тл, f_{res}=7.821 ТГц; (в, г) B_0=7 Тл, f_{res}=9.018 ТГц

Результаты расчета осевого отношения *AR* [4] рассеянного ТГц-излучения в точках сечения (φ=90˚) главного лепестка ДР RCS (рис. 1, б, г) на резонансных частотах f_{res} для различных значений B_0 представлены на рис. 3 а, б,.



а) б)

Рис. 3. *AR* (дБ) в точках сечения (φ=90˚) главного лепестка ДР RCS ($мкм^2$) ячейки графеновой метаповерхности на резонансных частотах для различных значений B_0: а) прошедшая волна, б) отраженная волна; 1 – B_0=0, 2 – B_0=2 Тл, 3– B_0=4 Тл; 4 – B_0=7 Тл. 5 – B_0=10 Тл

Из результатов следует, что при B_0=4 Тл в точках сечения (φ=90˚) главного лепестка ДР RCS ($мкм^2$) ячейки магнитоплазмонной графеновой метаповерхности (рис. 2, б) при θ=180˚ *AR*= 18 дБ (рис. 3, а, точка 3), при θ=0˚ *AR*=10.24 дБ (рис. 3, б, точка 3), т. е. поляризация прошедшей волны преобразовалась в эллиптическую, отраженной волны - в эллиптическую, близкую к круговой. При B_0=7 Тл ДР RCS ($мкм^2$) (рис. 2, г) при θ=180˚ *AR*= 18.42 дБ (рис. 3, а, точка 4), при θ=0˚ *AR*=5.17 дБ (рис. 3, б, точка 4), т. е. поляризация прошедшей волны преобразовалась в эллиптическую; отраженной волны – в круговую. Для сравнения при B_0=0, f_{0res} =7.175 ТГц *AR*=40 дБ как при θ=180˚ в точке 1 (кривая 1, рис. 3, а), так и при θ=0˚ в точке 1 (кривая 1, рис. 3, б), т. е. поляризация прошедшей и отраженной волн, как и падающей, строго линейная.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Rhouma M. B., Guizal B., Bonnet P. et al. Semi-analytical model for the analysis of a magnetically biased 1D subwavelength graphene-strip-grating. Optical Continuum, 2022, vol. 1, pp. 1144–1156.

2. Yang L., Tian J., Giddens H., Poumirol et al. Magnetically tunable graphene-based reflector under linear polarized incidence at room temperature. Applied Physics Letters, 2018, vol. 112, p. 151103.

3. CST Microwave Studio. Available online: (accessed on 18 May 2026).

4. Курушин А. А. Проектирование СВЧ-устройств в CST STUDIO SUITE. Москва: ДМК Пресс, 2016. 433 с.

Нетканые полимерные волокнистые материалы на основе биополимера, модифицированного оксидом графена

***Ольхов А.А.*[1,2,3], Карпова С.Г.[3], Зернова Ю.Н.[2], Филатова А.Г.[2], Иорданский А.Л.[2]**

e-mail: aolkhov72@yandex.ru

[1]ФГБОУ ВО "Российский экономический университет им. Г.В. Плеханова, Москва, Россия

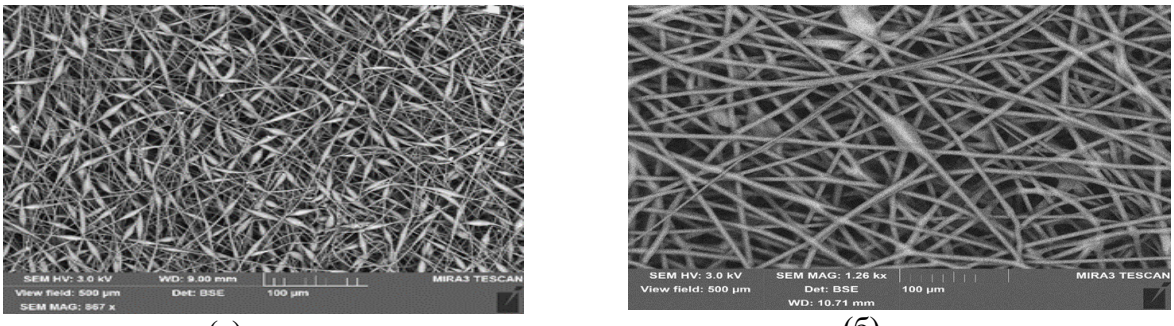
[2]ФИЦ химической физики им. Н.Н. Семенова РАН, Москва, Россия

[3]Институт биохимической физики им. Н.М. Эмануэля РАН, Москва, Россия

В настоящее время возрастает интерес к материалам, способным изменять свои физические и химические свойства в ответ на воздействия внешней среды, аналогично живым организмам, получившие название «умные/интеллек-туальные» материалы на основе графен/полимер стали предметом интенсивных исследований, что обусловлено их настраиваемой структурой и контроруемыми в широких пределах функциональными характеристиками.

В этой работе было проведено исследование фибриллярных бионанокомпозитов, содержащих ультратонкие волокна биополимера – поли-3-гидроксибутирата (ПГБ), модифицированные оксидом графена (ГО), а именно: (а) влияние содержания ГО на морфологию ПГБ и тенденцию к ассоциации с ГО; (б) выводы о влиянии внешних факторов, а именно гидротермального воздействия и озонолиза, на термическое и сегментарное динамическое поведение ПГБ как основного компонента бионанокомпозитов; (в) оценка влияния соотношения ГО/ПГБ на геометрию ультратонких волокон. Волокна получали методом электроформования полимерного раствора в хлороформе.

Изучение структуры, морфологии и сегментарной динамики бионанокомпозитов под воздействием температуры, влаги и озона чрезвычайно актуально с точки зрения оценки влияния окружающей среды на биоразлагаемые фибриллярные системы, когда каждый из процессов может проявляться как отдельный фактор аддитивного воздействия на полимерную матрицу или как сложная комбинация нескольких агрессивных факторов, приводящая к синергетическому механизму разрушения, результаты которого определяют экологическую безопасность с точки зрения токсичности продуктов разложения полимеров. В качестве модифицирующего вещества для создания волокнистых матриксов применяли добавки на основе оксидов графена представляли собой: оксид графена (ОГ) состава С – 59.2 ат. %, О – 31.9 ат. %, Н – 8.8 ат. %. и частично восстановленный оксид графита (ВОГ) состава С – 84.0 ат. %, О – 10.4 ат. %, Н – 5.6 ат. %.



(а) (б)

Рис. 1. Микрофотографии волокнистых материалов ПГБ (А), ПГБ–0,05% ОГ(Б).

На рис. 1 представлены микрофотографии нетканых волокнистых материалов ПГБ, содержащих различные концентрации оксида графена. Как видно на (рис. 1А), волокна ПГБ состоят из чередующихся цилиндрических и веретенообразных структур (утолщений). С добавлением электропроводящего ОГ в количестве 0,05% геометрия волокон заметно

улучшается. Характеристики раствора выравниваются. Количество утолщений значительно уменьшается (рис. 1 Б). При увеличении концентрации ОГ в 2 раза веретеноподобные утолщения исчезают практически полностью. При дальнейшем росте концентрации ОГ в полимерном растворе с 0,3 до 1 % можно наблюдать возникновение множество анизометричных структур и их протяженных агломератов в объеме нетканого волокнистого материала. Размеры дискретных шарообразных или более вытянутых структур порядка 10-30 мкм, более крупных агломератов порядка 50-100 мкм, а в отдельных случаях составляет свыше 100 мкм. Изменение структуры волокнистых материалов с ростом концентрации ОГ по всей видимости связана с неравномерностью распределения микропластин ОГ в полимерном растворе из-за склонности к агрегации в полимерном растворе в отсутствии принудительного перемешивания.

В работе были проведены исследования влияния агрессивных внешних факторов (высокая температура, вода, озон) на структуру композитных волокон. Влияние внешних факторов на структурно-динамические свойства композитного волокна, таких как гидротермальное воздействие на образцы в водной среде при температуре 70 °C и озонолиз, приводит к разрыхлению структуры волокон и снижению степени кристалличности, которые отражают два противоположных процесса, влияющих на структуру. Пластифицирующий эффект воды приводит к термическому разрушению ориентации сквозных цепей в аморфных областях ПГБ и последующему уменьшению доли кристаллической фазы, а также к агрегации нанолистов графена в ассоциаты, что снижает количество контактов между макромолекулами графена и увеличивает сегментальную подвижность

Таким образом, полученные результаты интерпретируются в рамках двух процессов, противоположно влияющих на ориентацию макромолекул в межкристаллитных областях. Гидротермальное воздействие может выступать в качестве фактора, термически разрушающего ориентацию с частичной потерей кристалличности, в то время как ассоциация с ГО частично снижает взаимодействие между ПГБ и ГО и, следовательно, увеличивает сегментарную подвижность волокон.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Fatima N.; Yaqub U.; ManshacIjaz Q.A.; Bhattia A.; Javaidd R.; Abbase Q.; Nadeema N. Recent developments for antimicrobial applications of graphene-based polymeric composites: A review. J. Ind. Eng. Chem. (Journal of Industrial and Engineering Chemistry), 2021, vol.100, №25, pp. 40-58.

Исследование влияния магнитного поля на свойства магнитной жидкости с агрегатами наночастиц магнетита

Орехова С.М.[1], ***Закинян А.Р.***[1]

e-mail: smorekhova@mail.ru
[1]*ФГАОУ ВО «Северо-Кавказский федеральный университет», Ставрополь, Россия*

Образование агрегатов существенно влияет на макроскопические свойства магнитных жидкостей. Возможность регулировать их микроструктурное упорядочение внешним магнитным полем позволяет использовать такие среды в качестве перспективных функциональных материалов [1, 2]. В данной работе приведена методика синтеза магнитной жидкости с агрегатами наночастиц магнетита, с объемным содержанием частиц твердой фазы Fe_3O_4 4.12% и 10.9% (рис. 1), и исследование физических свойств полученных образцов.

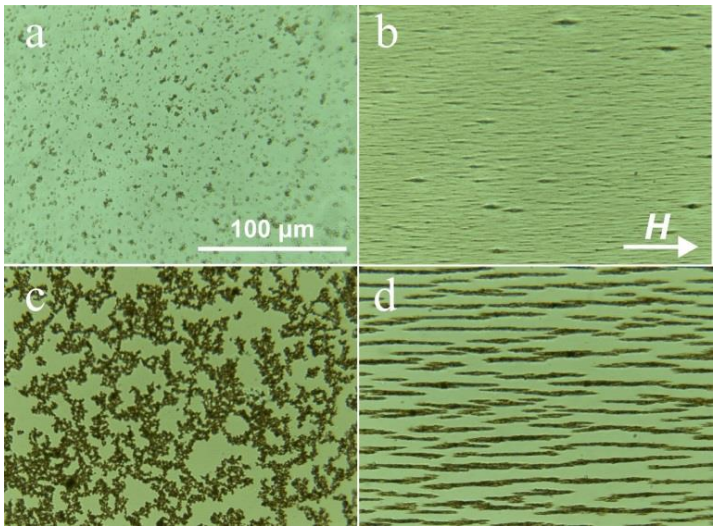


Рис. 1. Микрофотография агрегатов в феррожидкости в отсутствие магнитного поля (a, c) и под действием внешнего стационарного однородного магнитного поля (b, d). Объемная концентрация твердой фазы 4.12% (a, b) и 10.9% (c, d).

Исследованы различные физические свойства полученной коллоидной системы: электрические, магнитные, реологические, оптические, тепловые. Показано, что агрегаты реагируют на воздействие внешнего магнитного поля, объединяясь и ориентируясь вдоль направления приложенного поля. Образование и перестроение микроструктуры агрегатов в образце феррожидкости приводит к изменению ее макроскопических физических свойств. Обнаружено, что на них также оказывает влияние величина концентрации агрегатов, содержащихся в образцах.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Dikansky Yu. I., Gladkikh D. V., Zakinyan A. A., Sidorov A. V., Kunikin S. A. Magnetic and structural properties of magnetic colloids with a well-developed system of magnetized aggregates. Journal of Molecular Liquids, 2020, vol. 319, P. 114171.

2. Erin K. V., Kunikin S. A. Light scattering by magnetite nanoparticle aggregates under the action of a magnetic field. Technical Physics, 2007, vol. 52, P. 1324–1327.

Математическая модель на основе экспериментальных данных для прогнозирования скорости испарения бария с поверхности катода М-типа, модифицированного наноуглеродом

***Петрунин А.А.*[1], *Крачковская Т.М.*[2], *Глухова О.Е.*[1,2,3]**

e-mail: sacha.petrynin@gmail.com

[1]*ФГБОУ ВО «Саратовский национальный исследовательский государственный университет имени Н.Г. Чернышевского», Саратов, Россия*

[2]*АО «Научно-производственное предприятие "Алмаз"», 410033, Саратов Россия*

[3]*Первый Московский государственный медицинский университет имени И.М. Сеченова, 119991, Москва, Россия*

Металлопористые термокатоды (МПК) являются широко востребованными источниками электронов для различных современных электровакуумных приборов (ЭВП), таких как лампы бегущей волны, клистроны, гиротроны [1]. В зависимости от назначения ЭВП к МПК предъявляются различные требования по плотности эмиссионного тока и его стабильности во времени (долговечности), которые зависят от работы выхода электронов и скорости испарения активного вещества (в основном бария) с поверхности катода [2-3]. Для повышения его эмиссионных параметров исследуется применение различных перспективных наноуглеродных материалов, например, сульфоаддукта нанокластеров углерода – углерона в его составе [3]. Однако вследствие сложности и большой трудоемкости экспериментальных работ их проведение на практике чрезвычайно затруднено, поскольку требуются исследования зависимости скорости испарения активного вещества не только от конструктивных параметров катода, но и концентрации наноуглерода. В связи с этим актуальной задачей современной вакуумной эмиссионной электроники является разработка универсальной (пригодной для любого типа МПК) оперативной прогностической методики оценки скорости испарения активного вещества с эмитирующей поверхности. Данная работа посвящена разработке методики прогностической оценки скорости испарения бария с поверхности, определяемой типом катода и его индивидуальными параметрами – химическим составом, топологией поверхности и энергией активации эмитирующей поверхности. Методика разрабатывается на примере МПК М-типа с целью дальнейшего прогноза долговечности ЭВП.

На основе экспериментальных данных разработана прогностическая методика оценки скорости испарения G. Её теоретическую основу составляют: 1) формула Ленгмюра для скорости потери массы вещества и 2) уравнение Клайперона-Клаузиуса. Выражение для скорости испарения при заданной температуре T имеет вид вид:

$$G = \sqrt{\frac{M}{2\pi RT}}\, p_0{}' \cdot \sqrt{\frac{1}{T}}\, exp\left[q \cdot 1.16 \cdot \left(\frac{10^4}{T_0} - \frac{10^4}{T}\right)\right]. \quad (1)$$

Здесь M - молярная масса, R - универсальная газовая постоянна. Методика позволяет найти характеристический набор параметров для рассматриваемого типа катода: p_0' – давление, T_0 – температуру, q – энергию активации. Эффективность методики доказана предсказанием зависимости скорости испарения бария от температуры для катодов М-типа, при этом погрешность воспроизведения экспериментальных данных составила не более 15%.

Для катодов М-типа с W-матрицей с плотностью 13.85±0.01 г/см^3 и толщиной покрытия Os-Ir-Al в интервале 0.35-0.39 мкм измерены значения скорости испарения бария для двух значений концентрации 0.15 мас. % и 0.30 мас. % углерона в активном веществе при температурах 1100, 1150 и 1200 °C [4]. В результате применения разработанной методики, были определены параметры q, p_0', T_0 для этого типа катода с концентрацией углерона n=0.15% и n=0.30%, и представлены в табл. 1.

Таблица 1. **Рассчитанные характеристические параметры катода М-типа с углероном**

n, %	q, eV	p_0', μPa	T_0, K
0.15	3.129	9.467	1354.4
0.30	3.520	1.729	1334.9

Далее на основе этих данных построена математическая модель для вычисления скорости испарения бария с поверхности катода в зависимости от концентрации n углерона в составе матрицы катода. На первом этапе построена функция $q(n)$, для этого использован подход экстраполяции с применением ранее определенной экспоненциальной зависимости:

$$\ln q = 0.170 \cdot \ln n + 1.463. \quad (2)$$

Вторым этапом построены аналитические функции $p_0'(n)$ и $\mathrm{T}_0(n)$ на основе ранее выявленных квадратичных зависимостей:

$$p_0' = -11.163 \cdot \ln n - 11.711, \quad (3)$$

$$\mathrm{T}_0 = -28.075 \cdot \ln n + 1301.1. \quad (4)$$

На основе построенной математической модели проведена прогностическая оценка поведения скорости испарения G для катодов в зависимости от концентрации углерона при постоянной плотности состава W-матрицы 13.85±0.01 г/см^3. На рис. 1 представлены рассчитанные зависимости для G (точками отмечены данные, полученные на основе эксперимента) при различных значениях концентрации – от 0.00% до 0.40%.

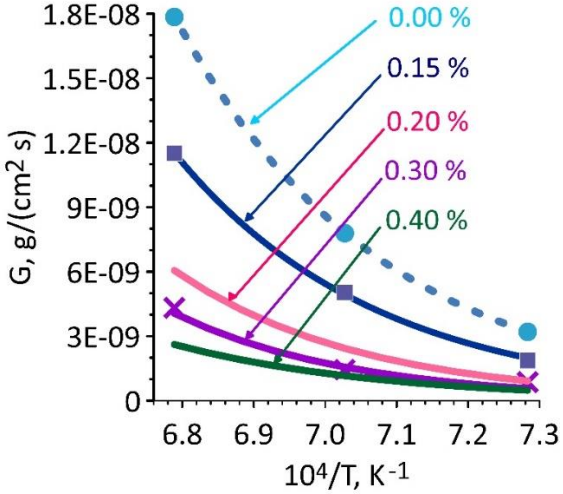


Рис. 1. Зависимость скорости испарения бария от концентрации содержания углерона в составе катода М-типа при одной и той же плотности W-матрицы.

Финансирование: Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации в рамках Государственного задания (проект № FSRR-2026-0006).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Roy A. Advances in high-power microwave amplifier design. Microwave Journal, 2024, vol. 67, p. 124.

2. Gaertner G., Knapp W., Forbes R. G. Field emission physics and technology: recent advances and future prospects. Topics in Applied Physics, 2020, vol. 135.

3. Крачковская Т. М. Перспективные материалы для СВЧ-устройств нового поколения. Электронная техника. Серия 1: СВЧ-техника, 2026, вып. 1, с. 107.

4. Емельянов А. С., Крачковская Т. М., Шестеркин В. И., Журавлёв С. Д., Биктимирова Г. Р., Шумихин К. В. 65 лет деятельности на рынке СВЧ-электроники: итоги и современные тенденции. В: Материалы юбилейной научно-технической конференции АО «НПП „Алмаз“». Саратов: Саратовский государственный технический университет, 2022, с. 33–37.

Исследование зависимостей фотокаталитических свойств и фотоактивности в зависимости от температуры электролита и последующей термической обработки

***Прудникова М.Ю.*[1], *Бутманов Д.Д.*[1], *Савчук Т.П.*[1]**

e-mail: prudnikovamaria81@gmail.com
[1]*НИУ МИЭТ«Московский институт электронной техники», Зеленоград, Россия*

Фотокатализ получил развитие после открытия фотокаталитического расщепления воды, как альтернатива биодеградации, неэффективной для устойчивых токсичных органических загрязнителей [1]. Преимущества метода: частичная минерализация соединений до CO_2 и H_2O, работа при комнатной температуре и атмосферном давлении, отсутствие потребности во внешнем кислороде, низкая стоимость и отсутствие вторичных отходов.

Среди исследованных фотокатализаторов (ZnO, WO_3, Fe_2O_3, CdSe, $SrTiO_3$) оксид титана (TiO_2) является наиболее распространенным, однако порошковая структура данного материала при нанесении наночастиц на подложку для более эффективного освещения катализатора приводит к уменьшению удельной площади поверхности и не гарантирует хорошей адгезии полупроводника к подложке [2]. Повышение удельной площади поверхности — ключевой фактор эффективности фотокатализатора. Анодное окисление титана позволяет формировать наноструктуры непосредственно на подложке, сочетая высокую удельную площадь, стабильную адгезию и высокую стабильность свойств. Удельная площадь поверхности массивов НТАОТ напрямую связана с условиями их получения. Сформированные нанотрубки имеют двухслойную структуру: внутренний слой содержит оксид титана с продуктами разложения этиленгликоля от электролита, а внешний — чистый оксид титана. Поскольку после анодного окисления материал находится в аморфном состоянии, требуется термическая обработка для кристаллизации. При этом органические компоненты могут взаимодействовать с оксидом титана, что приводит к самолегированию углеродом [3].

В ходе проведения работы предложен метод контроля содержания остаточного углерода в наноструктурированном оксиде титана путём варьирования температуры электролита при анодном окислении. Регулирование концентрации углеродных примесей позволяет настраивать оптические свойства материала, в частности обеспечивать фотокаталитическую активность в видимом диапазоне спектра. Подход обладает научной новизной за счёт выявления температурной зависимости процесса самодопирования углеродом. В настоящей работе проведено систематическое исследование влияния двух ключевых технологических параметров — температуры электролита в ходе анодного окисления титана (в диапазоне от –5 до +40 °C) и температуры последующего термического отжига (350–500 °C) — на структурно-морфологические характеристики и фотоэлектрические свойства массивов нанотрубок анодного оксида титана.

Фазовый состав полученных структур определяли комплексно: методом рентгеновской дифрактометрии (РФА) на дифрактометре с излучением Cu Kα ($\lambda = 1{,}54$ Å) для идентификации кристаллических фаз, а также спектроскопией комбинационного рассеяния света (КРС) с возбуждением лазером 532 нм. Морфологию и геометрические параметры нанотрубок (диаметр, высота, количество пор на см) анализировали с помощью растровой электронной микроскопии в режиме вторичных электронов при ускоряющем напряжении 5–15 кВ.

Оптические параметры образцов были исследованы с помощью спектрофотометра СФ-56 (Санкт-Петербург, Россия) с использованием приставки диффузионного отражения. В качестве источника излучения использовали дейтериевая и галогенная лампы. Измерение проводились в диапазоне длин волн 190 - 1100 нм, шаг дискретизации 1 нм, ширина щели 6 нм. Используя получение, данные были построены спектры диффузного отражения. По

результатам расчетов, выполненных с использованием теории Кубелки-Мунка, была определена оптическая ширина запрещённой зоны образцов.

Фотоактивность количественно оценивали по величине стационарного фототока в трёхэлектродной электрохимической ячейке. Для исследования образцов использовался программно-аппаратный комплекс на основе аппаратуры для фотоэлектрохимических измерений Zolix SCS10-PEC, состоящей из ксеноновой лампы, монохроматора и фотоэлектрохимической ячейки. С помощью кремниевого фотодиода фиксируют мощность падающего излучения для каждой измеряемой длинны волны. Фотокаталитическую активность полученных образцов оценивали по фотокаталитическом обесцвечивании водного раствора метиленового голубого (МГ). Температуру реакционной среды устанавливали на уровне 20°C с помощью криотермостата. Обесцвечивание раствора оценивали с помощью спектрофотометра СФ-102. Для расчета изменения концентрации МГ использовали ранее полученную калибровочную кривую.

Полученные результаты демонстрируют взаимосвязь между температурными режимами синтеза, фазовым составом, морфологией нанотрубок и их фотоактивность. Выявленные закономерности имеют практическую значимость для оптимизации технологии формирования массивов нанотрубок анодного оксида титана с заданными спектральными характеристиками.

Финансирование: Работа выполнена в рамках государственного задания 2026-2028 FSMR-2026-0005 (№075-03-2026-239 от 16.01.2026).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Fujishima A., Honda K. Electrochemical photolysis of water at a semiconductor electrode. Nature, 1972, vol. 238, pp. 37–38.

2. Zhang J. et al. Photocatalysis. Lecture Notes in Chemistry, 2018, vol. 100.

3. Zakir O. et al. Effect of anodization time on the morphological, structural, electrochemical, and photocatalytic properties of anodic TiO_2 NTs. Journal of Solid State Chemistry, 2023, vol. 322, p. 123939.

Эллипсометрический контроль динамики роста толщины пленки оксидов меди. анализ динамики нарастания оксидного слоя на медной подложке с применением неразрушающего контроля

О.В. Годляускас[1, 2], В.В. Яцышен[1]

e-mail: khtnmma-231_412376@volsu.ru
[1]ФГАОУ ВО «Волгоградский Государственный Университет», Волгоград
[2]АО «ВНИКТИнефтехимоборудование», Волгоград

Повышенная точность приборов, ориентированных на регистрацию окислительных процессов на металлических поверхностях, имеет критическое значение для современной радиоэлектроники и высокотехнологичных производств. Необходимо подчеркнуть, что медь выступает базовым материалом для токопроводящих цепей[1,2], где образование даже тонкого оксидного слоя ведет к росту сопротивления и потере надежности контактов[4]. Исходя из этого, актуальным является использование эллипсометрических методов анализа. Данный подход позволяет не только сохранять целостность исследуемых структур, но и обеспечивать прецизионный мониторинг динамики роста пленок в реальном времени.

Исследование динамики роста оксидной пленки на поверхности меди (Cu) проводилось на смоделированных системах, параметры которых были определены на основе комплексной диэлектрической проницаемости. Диэлектрическая проницаемость подложки меди соответствовала ε =-11.5+1.8i, а для формирующегося слоя оксида меди (Cu_2O) она составляла ε =7,29. Длина волны зондирующего излучения равнялась 0,64 мкм.

Анализ динамики изменения параметров ρ и Δ.

С помощью данных, полученных после проведения математического моделирования, были построены графики зависимости эллипсометрических параметров от временного интервала t, благодаря которым стало возможно определить зоны максимальной чувствительности системы. Изменение толщины пленки (d) происходило по заданному закону: d= λ /4+(t-1)×0.005.

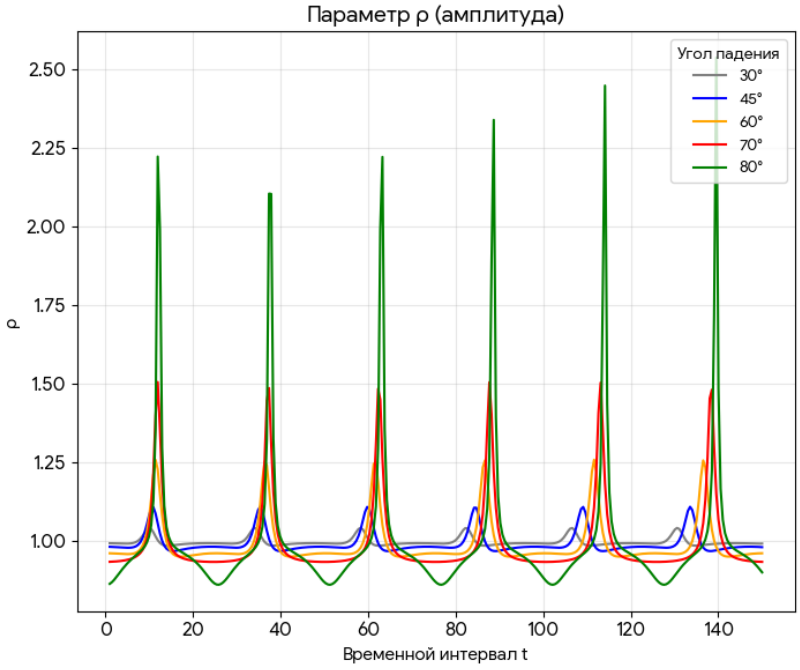


Рис.1. Зависимость эллипсометрического параметра ρ отраженного света от толщины пленки окисла в микронах для углов падения 30°, 45° и 60°, 70º, 80º

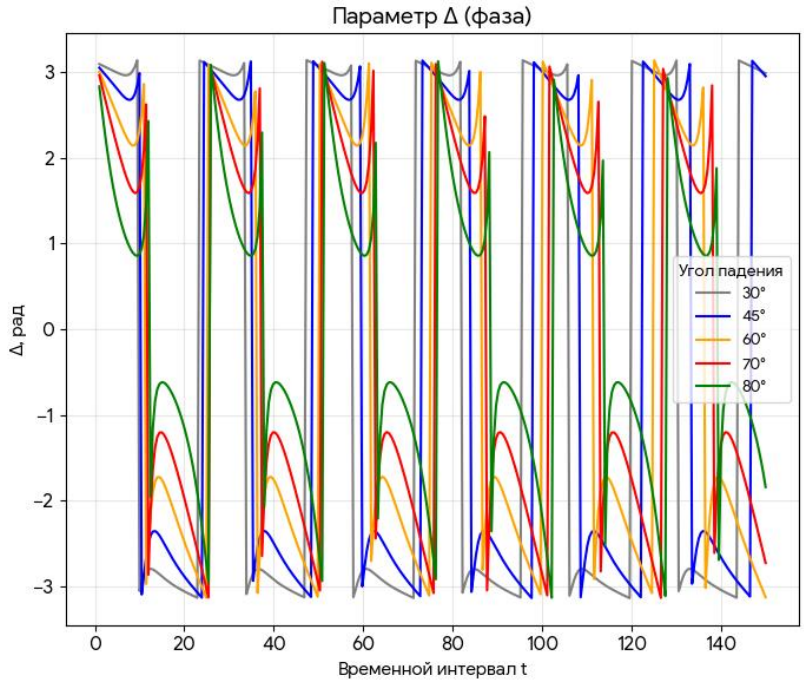


Рис. 2. Зависимость эллипсометрического параметра Δ отраженного света от толщины пленки окисла в микронах для углов падения 30°, 45° и 60°, 70º, 80º

Выбор углов вблизи 70°–80° значительно улучшает точность детекции, создавая условия для резкого изменения фазы и глубоких минимумов амплитуды. Анализ полученных данных свидетельствует об устойчивой периодичности сигналов, что указывает на возможность применения метода для точного измерения толщины.

Анализ изменений показал, что вблизи главного угла падения меди наблюдаются практически вертикальные скачки фазы Δ. Это обусловлено тем, что в данной спектральной области

-компонента отраженного света минимальна. Данный эффект обеспечивает формирование «зоны максимальной точности», позволяя фиксировать рост оксида на самых ранних этапах временного интервала.

Заключение

Выполненное исследование по определению динамики роста оксидной пленки на меди демонстрирует высокую чувствительность эллипсометрических параметров вблизи главного угла падения. Показатели изменений ρ и Δ соответствуют интерференционным эффектам в диэлектрическом слое, что указывает на перспективу их применения для неразрушающего контроля. Отличия в динамике параметров при разных углах подтверждают селективность метода в отношении условий измерения.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Azzam R.M., Bashara N.M. Ellipsometry and polarized light. Amsterdam: Elsevier, 1987.536 p.

2. Tompkins H., Hilfiker J. N. Spectroscopic ellipsometry: A practical guide. Hoboken: Wiley, 2015. 320 p.

3. Salehi S., Rahman M. A., Khan M. R. et al. Highly sensitive carbon nanotubes–SnO_2 nanocomposite sensor for acetone detection in diabetes mellitus breath. Sensors and Actuators B: Chemical, 2014, vol. 205, pp. 261–267.

4. Сидоркин А.С., Ховив А.М. Лазерно-стимулированное оксидирование поликристаллической меди. Физика твёрдого тела, 2020, т. 62, вып. 5, с. 789–795.

5. Свиташева С. Н. Развитие метода эллипсометрии для исследования наноразмерных плёнок диэлектриков, полупроводников и металлов. Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования, 2019, № 8, с. 45–52.

Электрохимическое получение оксида графена: физико-химические и сорбционные свойства

Круглова А.С.[1], ***Дмитриева Е.Д.***[1]

e-mail: kruglova220704@gmail.com
[1]*ФГБОУ ВО «Тульский государственный университет», Тула, Россия*

Оксид графена (ОГ) – перспективный материал для сенсорики, катализа, электрохимических устройств и сорбционных технологий благодаря высокой удельной поверхности, механической прочности и гидрофильности, обусловленной наличием кислородсодержащих групп. Экологически безопасным методом синтеза является электрохимическая эксфолиация графита в водном электролите. В процессе анодного окисления происходит интеркаляция ионов, генерация радикалов (•OH), окисление углеродной решётки с выделением CO, CO_2, O_2, что приводит к отслоению графеновых слоёв и частичной sp^3-гибридизации.

Цель работы – получение ОГ методом электрохимической эксфолиации и определение его физико-химических (структурных, кислотно-основных) и сорбционных свойств по отношению к ионам Pb^{2+}, Cd^{2+}, Cu^{2+}, Fe^{2+}.

В данной работе эксфолиацию проводили в двухэлектродной ячейке при 7,5 В в течение 60 мин (гальванопотенциостат Coretest CS1350). Полученная суспензия ОГ имела концентрацию 0,23±0,01 мг/см³. Структуру наноматериала изучали методами ИК- и КР-спектроскопии. Размер частиц определяли методом динамического рассеяния света, удельную поверхность – по адсорбции метиленового голубого. Кислотно-основные свойства исследовали потенциометрическим титрованием и циклической вольтамперометрией. Сорбцию ионов металлов изучали в статических условиях (7 суток, ионная сила – 4M $NaNO_3$); концентрации металлов: Pb^{2+} 1–60, Cd^{2+} 1–60, Cu^{2+} 1–90, Fe^{2+} 1–90 мг/дм³. Анализ – спектрофотометрический (ксиленоловый оранжевый, сульфосалициловая кислота, о-фенантролин).

ИК-спектр ОГ содержит характерные полосы (рисунок 1 (а)): гидроксильные группы и адсорбированная вода (3600–3200 см⁻¹), асимметричные и симметричные колебания CH_2 (2926 и 2850 см⁻¹), карбонильные группы (1740 см⁻¹), C=C (1620–1632 см⁻¹), C-OH (1410–1422 см⁻¹), эпоксидные C-O-C (1263–1258 см⁻¹) и C-O (1110–1120 см⁻¹).

КР-спектроскопия (532 нм) показала высокое отношение S_D/S_G = 1,96±0,04, что указывает на высокодефектную структуру с нарушением sp^2-гибридизации (рисунок 1 (б)). Дополнительные отношения $S_{D'}/S_G$ = 0,28±0,03 и $S_{D''}/S_G$ = 0,4±0,1 подтверждают наличие искажений углеродной плоскости.

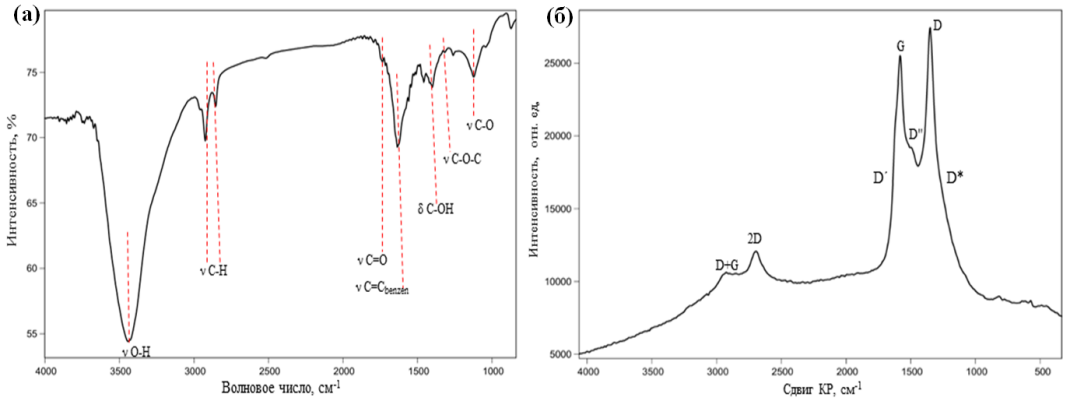


Рис. 1. ИК-спектр (а) и КР-спектр оксида графена (б).

Физико-химические характеристики (содержание ОГ, ООУ, содержание фенольных групп, размер частиц и удельную поверхность) для оксида графена представлены в таблице 1.

Таблица 1 – Физико-химические характеристики оксида графена

Шифр	Содержание оксида графена, мг/см^3	ООУ, мг/см^3	Содержание фенольных групп, мг $C_6H_8O_6$/ г ООУ	$S_{уд}$, м^2/г	Γ_∞ (МГ), г/г	Размер частиц, нм
ОГ	0,23±0,01	0,42±0,03	0,025±0,001	2000±400	0,8±0,2	280

Примечание к таблице: ООУ – содержание общего органического углерода в суспензии; МГ – метиленовый голубой.

Высокое значение удельной поверхности (2000±400 м²/г) и маленький размер дисперсных частиц (280 нм), определенные в условиях диспергирования в воде, свидетельствуют о высокой развитости межфазной поверхности материала в его рабочем состоянии.

Потенциометрическим титрованием установлено содержание карбоксильных групп 9,6±0,6 ммоль/г, фенольных – 2,4±0,3 ммоль/г. Константы диссоциации: pKa_1(COOH) = 6,12±0,01, pKa_2(OH) = 10,37±0,02. Данные циклической вольтамперометрии (pKa_1 = 4,20±0,03) подтверждают гетерогенность поверхности. Суммарное содержание функциональных групп (~12 ммоль/г) обеспечивает высокую сорбционную ёмкость.

Изотермы адсорбции адекватно описываются моделями Ленгмюра и Фрейндлиха (коэффициенты корреляции R > 0,98). Расчетные значения представлены в таблице 2.

Таблица 2 – Параметры изотерм Фрейндлиха и Ленгмюра

Образец	Металл	Фрейндлих			Ленгмюр		
		K_F	n	R	Γ_∞, мг/г	K, мг/дм^3	R
Оксид графена	Pb^{2+}	2,4±0,1	0,71±0,04	0,9860	380±10	64,2±0,5	0,9971
	Cd^{2+}	2,27±0,06	1,24±0,05	0,9882	340±10	44,2±0,2	0,9989
	Cu^{2+}	2,0±0,1	0,76±0,08	0,9864	450±20	54,3±0,9	0,9948
	Fe^{2+}	5,76±0,01	1,05±0,01	0,9998	1350±30	52,8±0,3	0,9998

Предлагаемый материал обладает повышенной сорбционной способностью по отношению к модельным ионам тяжелых металлов. Параметр 1/n в уравнении Фрейндлиха (от 0,71 до 1,24) указывает на благоприятные условия сорбции во всём диапазоне концентраций. Установлена селективность: $Fe^{2+} > Cu^{2+} > Pb^{2+} > Cd^{2+}$. Максимальная ёмкость для Fe^{2+} достигает 1350 мг/г.

При обработке модельных растворов с концентрацией 150 ПДК степень извлечения составила: Pb^{2+} – 84,5±0,1 %, Fe^{2+} – 87,1±0,4 %, Cd^{2+} – 90,86±0,06 %, Cu^{2+} – 82,1±0,2 %. Во всех случаях степень извлечения превышает 80 %, что свидетельствует о высокой эффективности сорбента даже при повышенных исходных концентрациях (до 250 мг/дм³).

Таким образом, в настоящей работе методом электрохимической эксфолиации получен оксид графена. Проведена его комплексная физико-химическая характеризация и оценена связывающая способность по отношению к ионам Pb^{2+}, Fe^{2+}, Cd^{2+} и Cu^{2+}. Установлено, что полученный материал обладает высокой удельной поверхностью (2000 м²/г) и обеспечивает степень извлечения тяжёлых металлов до 90,9 %, что подтверждает перспективность его использования в экоадаптивных технологиях для очистки и ремедиации водных экосистем без риска вторичного загрязнения.

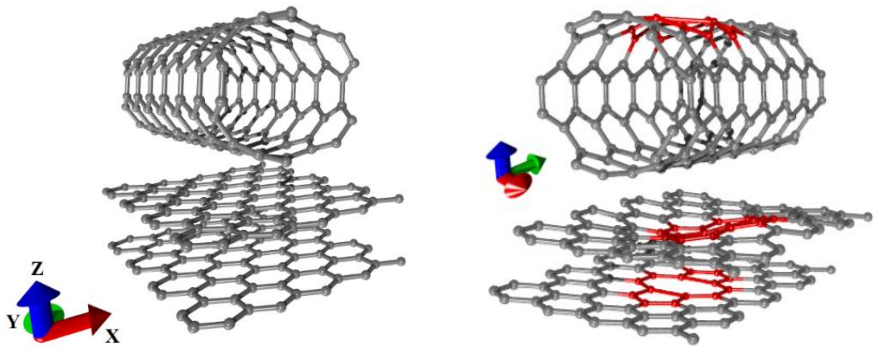
Влияние точечных дефектов на электронные и электрические свойства графен-нанотрубных композитных пленок

Прудникова Е.А.[1], ***Слепченков М.М.***[1]

e-mail: yevgeniya.prudnikova.02@mail.ru
[1]*ФГБОУ ВО «Саратовский национальный исследовательский государственный университет», Саратов, Россия*

В настоящее время элементная база устройств наноэлектроники создается на основе низкоразмерных материалов, обладающих уникальными свойствами и характеристиками [1]. Одним из наиболее перспективных материалов для этой цели считается углерод, среди аллотропных модификаций которого широко востребованы графен и углеродные нанотрубки (УНТ) [2]. В целях дальнейшего улучшения показателей прочности, электро- и теплопроводности углеродных наноматериалов исследователи стали рассматривать возможность создания углеродных композитов в виде различных структурных сочетаний УНТ и графена. Создаваемые композитные структуры графен/УНТ могут быть использованы в качестве гибких и прозрачных электродов для транзисторов, диодов, аккумуляторных батарей, сенсоров [3]. Синтезируемые в реальном эксперименте графен и УНТ могут содержать различного рода структурные дефекты, оказывающие влияние на их физико-химические свойства. К числу таких дефектов относят одиночную и двойную вакансию, дефекты замещения атомов и дефекты перестройки связей (Стоуна–Уэльса) [4]. Целью настоящей работы является установление закономерностей влияния точечных дефектов на электронно-энергетические и электрические характеристики композитных углеродных пленок графен/УНТ методами атомистического моделирования. Для проведения исследований использовался метод функционала плотности в приближении сильной связи (DFTB) [5]. При DFTB-расчетах используется минимальный базисный набор валентных орбиталей и двухцентровое приближение, что позволяет выполнять моделирование систем, содержащих тысячи атомов, с вычислительными затратами на несколько порядков ниже, чем при использовании полных DFT-расчетов.

Объектом исследования являлись композитные квази-2D пленки, образованные бислойным графеном с типом укладки слоев AA, где каждый атом одного слоя находится над атомами другого слоя, и одностенными УНТ (ОУНТ) типа «armchair» с индексами хиральности (5,5) и диаметром ~ 0.8 нм, ориентированными вдоль направления «armchair» графенового листа (вдоль оси Y). Взаимодействие между AA-бислойным графеном и ОУНТ (5,5) осуществляется посредством слабых сил Ван-дер-Ваальса. На рис. 1а показана исходная супер-ячейка композитной пленки бислойный графен/ОУНТ(5,5). Были рассмотрены атомные конфигурации композитных пленок бислойный графен/ОУНТ (5,5) с различными комбинациями точечных дефектов двух типов: дефекты двойной вакансии и дефекты Стоуна–Уэльса. Дефекты вводились как в нанотрубку, так и в слои графена, что позволило исследовать их индивидуальное и комбинированное влияние на свойства композитной пленки бислойный графен/ОУНТ (5,5). В качестве примера на рис. 1б показана супер-ячейка композитной пленки бислойный графен/ОУНТ (5,5), в которой слои графена и нанотрубка содержат дефекты двойной вакансии (область дефекта выделена красным цветом). Для каждой супер-ячейки проводилась оптимизация атомной структуры для выявления равновесной конфигурации композитной пленки бислойный графен/ОУНТ (5,5). После этого выполнялась оценка термодинамической устойчивости по величине энергии связи E_b, определяемой как разность полных энергий пленки бислойный графен/ОУНТ (5,5) и бислойного графена и ОУНТ (5,5) по отдельности. Далее рассчитывались энергетические зонные диаграммы, по которым определялись значения уровня Ферми. Расчет электропроводности выполнялся в рамках формализма Ландаура-Буттикера [6] в направлении токопереноса вдоль оси нанотрубок.



а) б)

Рис. 1. Атомная структура супер-ячейки композитной пленки бислойный графен/ОУНТ(5,5) в отсутствие дефектов (а) и при наличии дефектов ванакасии и Стоуна-Уэльса (выделены красным цветом) (б)

По результатам проведенных расчетов было установлено, что электронное строение и электропроводность композитных графен-нанотрубных пленок чувствительны и к симметрии распределения дефектов между боковыми стенками нанотрубки и листами графена, и к типу распределяемых дефектов. В частности, наибольшая величина электроповодности (0.17 мА) была достигнута для супер-ячейки с дефектами двойной вакансии, расположенными по одному в каждом из графеновых листов, и дефектом Стоуна-Уэльса, расположенным на верхней боковой стенки ОУНТ (5,5). Энергия связи E_b в этом случае составляет -2.3 эВ, что свидетельствует о термодинамической устойчивости данной структурной конфигураци. Варьируя типом структурных дефектов и их распределением между листами графена и нанотрубкой, можно управлять электропроводностью графен-нанотрубных пленок.

Финансирование: Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РНФ № 24-79-10316.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Goel N., Kumar R. Physics of 2D Materials for Developing Smart Devices. Nano-Micro Letters, 2025, vol. 17, P. 197.

2. Choudhary N., Hwang S., Choi W. (2014). Carbon Nanomaterials: A Review. In: Bhushan, B., Luo, D., Schricker, S., Sigmund, W., Zauscher, S. (eds) Handbook of Nanomaterials Properties. Springer, Berlin, Heidelberg.

3. Pyo S., Eun Y., Sim J., Kim K., Choi J. Carbon nanotube-graphene hybrids for soft electronics, sensors, and actuators. Micro and Nano Systems Letters, 2022, vol. 10, №. 1, P. 9.

4. Bhatt M. D., Kim H., Kim G. Various defects in graphene: a review. RSC advances, 2022, vol. 12, № 33, pp. 21520–21547.

5. Elstner M., Seifert G. Density functional tight binding. Phil. Trans. R. Soc. A, 2014, vol. 372, pp. 20120483.

6. Datta S. Quantum Transport: Atom to Transistor. New York, Cambridge University Press, 2005. 405 p.

Спектрально-селективное управление передачей поверхностных спиновых волн в двухслойной ЖИГ-структуре с локально нагретой областью

Пташенко А.С.[1], ***Садовников А.В.***[1]

e-mail: andrey.po3@mail.ru
[1]*ФГБОУ ВО «СГУ имени Н.Г. Чернышевского», Саратов, Россия*

Рассмотрено распространение поверхностных магнитостатических волн (ПМСВ) в двухслойной пленке железо-иттриевого граната (ЖИГ) при наличии локальной области пониженной намагниченности насыщения, формируемой лазерным нагревом. Показано, что увеличение глубины магнитной ямы приводит к сужению высокочастотной полосы прохождения и росту частотной селективности. Микромагнитное моделирование подтверждает применимость термомагнитной модели локального уменьшения M_s для описания наблюдаемой перестройки амплитудно-частотной характеристики.

ЖИГ-микроволноводы являются одной из базовых платформ магноники благодаря малым потерям и возможности целенаправленного управления дисперсией спиновых волн. Пространственно-неоднородное термомагнитное воздействие позволяет динамически изменять локальные условия распространения ПМСВ без модификации геометрии волновода и без введения дополнительных металлизированных элементов. В настоящей работе исследуется двухслойная структура в геометрии Дэймона-Эшбаха для положительного направления поля смещения, где влияние локального нагрева на модовый состав проявляется наиболее отчетливо.

Использована двухслойная эпитаксиальная ЖИГ-структура с параметрами: d_1=6.9 мкм, d_2=8.9 мкм, M_1=904 Гс, M_2=1738 Гс, ширина волновода w=1 мм. Локальный нагрев позволяет формировать стационарную магнитную яму с управляемой глубиной. Микромагнитное моделирование выполнено в MuMax3. Магнитная яма задавалась в виде локального уменьшения намагниченности насыщения:

$$M_s(x,y) \approx M_0 \quad \boldsymbol{\beta}[T(x,y)-T_t],$$

где M_0 — намагниченность при комнатной температуре, $\boldsymbol{\beta}$ — коэффициент термочувствительности, T_t — комнатная температура. Для параметризации глубины неоднородности использован безразмерный коэффициент $\boldsymbol{\delta}=M_s/M_0$. Уменьшение δ соответствует росту температуры в лазерном пятне и усилению неоднородности внутреннего магнитного поля.

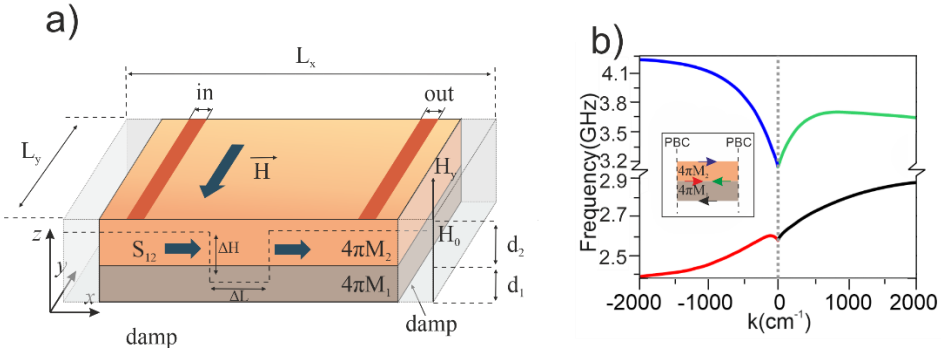


Рис. 1. Структура для моделирования и дисперсия ПМСВ.

На рис.2 приведены результаты микромагнитного моделирования АЧХ для разных глубин магнитной ямы. При уменьшении δ наблюдается устойчивое сужение высокочастотного окна прохождения и одновременное углубление спектрального минимума. Такой отклик связан с перестройкой локальной дисперсии в нагретой области, изменением

фазовых набегов ширинных мод и усилением межмодовой конверсии после прохождения зоны неоднородности.

Дополнительно следует отметить, что глубина подавления определяется не только параметром δ, но и геометрическим фактором — отношением эффективного диаметра нагретой зоны к ширине волновода. Это открывает возможность двухпараметрической настройки: мощность лазера управляет глубиной магнитной ямы, а фокусировка — пространственной резкостью профиля. Такой подход может быть использован при разработке компактных перестраиваемых фильтров, переключателей и элементов аналоговой обработки СВЧ-сигналов на основе магнонных микросхем.

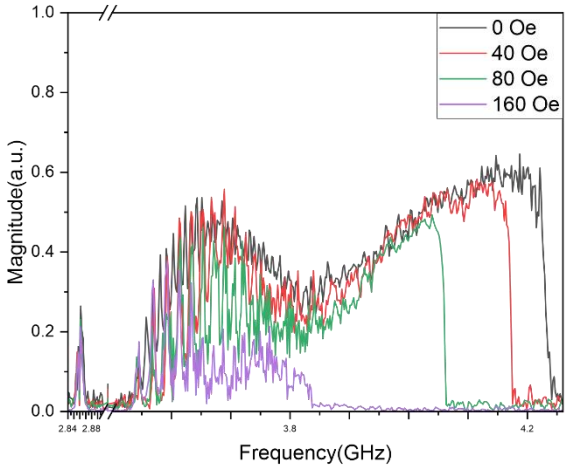


Рис. 2. Микромагнитное моделирование АЧХ ПМСВ для разных значений δ.

Таким образом, локальная магнитная яма, индуцируемая лазерным нагревом, обеспечивает эффективное и физически прозрачное управление прохождением ПМСВ в двухслойной ЖИГ-структуре. Углубление ямы приводит к сужению высокочастотной полосы и росту спектральной селективности, а моделирования подтверждает перспективность лазерно-управляемых термомагнитных неоднородностей для создания перестраиваемых магнонных элементов СВЧ-диапазона.

Финансирование: Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда в рамках выполнения проекта № 23-13-00373.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Chumak A. V., Serga A. A., Hillebrands B. Magnon Spintronics. Nature Physics, 2015, vol. 11, pp. 453–461.

2. Serga A. A., Chumak A. V., Hillebrands B. YIG Magnonics. Journal of Physics D: Applied Physics, 2010, vol. 43, p. 264002.

3. Gubanov V. A. et al. Frequency-Selective Spin-Wave Propagation in Magnonic Waveguide with a Local Laser-Heated Region. Physical Review B, 2023, vol. 107, p. 024427.

4. Demokritov S. O. et al. Tunneling of Dipolar Spin Waves through a Region of Inhomogeneous Magnetic Field. Physical Review Letters, 2004, vol. 93, p. 047201.

Модификация электроизоляционного компаунда наноуглеродными структурами для улучшения его физических свойств

***Крачковский С.В.*[1], *Пузанов А.М.*[1], *Крачковская Т.М.*[1], *Калистратов Н.А.*[1]**

e-mail: PuzanovAM@almaz-rpe.ru
[1]*АО «НПП «Алмаз», Саратов, Россия*

В настоящее время в ряде радиоэлектронных систем военного и гражданского назначения широко применяются комплексированные СВЧ-устройства, состоящие из лампы бегущей волны (ЛБВ) и высоковольтного источника питания (ВИП), ввиду отсутствия стыковочных проблем сопрягаемых изделий у потребителя [1]. Однако, при массовом изготовлении ВИП одной из технологических проблем является частое внутреннее растрескивание полимеризованного электроизоляционного компаунда (ПК-68) во время проведения климатических испытаний при температурах от -60 °С до +85 °С и необходимость повторной заливки с целью устранения появившихся трещин, что удлиняет производственный цикл и снижает надежность ВИП. Поэтому актуальной задачей является повысить качество электроизоляционного компаунда. Для улучшения механических свойств компаунда было предложено ввести в его состав различные стабилизирующие агенты: 1) базальтовую микрофибру с добавлением каталитических доз углеродных наноразмерных частиц тороидальной формы (астраленов) ТУ 5761-014-13800624-2004; 2) собственно астралены ТУ 2166-001-13800624-2003. Микрофибра предназначена для дисперсного армирования композиционных материалов, а астралены выступают как многофункциональные нанонаполнители, эффективно распределяя нагрузку в полимерной матрице благодаря своей сферической форме, поэтому добавление их в малых концентрациях может улучшить свойства компаунда [2-3].

Образцы стандартного компаунда и компаундов, модифицированных фиброй и астраленами в разных концентрациях, были испытаны на разрыв по ГОСТ 11721-78, их вид представлен на рис.1. Также были определены электропрочность и время полимеризации.



Рис. 1. Образцы компаундов для механических испытаний.

В таблице 1 представлены характеристики стандартных и модифицированных образцов компаунда.

Из таблицы 1 следует, что обе присадки дают эффект упрочнения компаунда без ухудшения диэлектрических характеристик. Однако лучший эффект как по механической прочности, так и по снижению времени полимеризации достигается при добавлении астраленов в концентрации 0,005 % мас.

На рис. 2 показан узел ВИП, залитый модифицированным компаундом с добавлением астраленов в концентрации 0,005 % мас., прошедший операцию термоциклов при температурах от -(60±3) °С до +(85±3) °С.

Таблица 1. Характеристики образцов электроизоляционных компаундов.

Концентрация модификатора в компаунде, % мас.	**Значение электропрочности, кВ\мм**	**Прочность на разрыв, Кгс/см²**	**Время полимеризации, ч**
С присадкой астраленов			
0,005	35	2,3	48
0,01	35	2,15	
0,015	35	2,15	
С присадкой микрофибры			
0,45	35	1,8	Не менее 72
Без добавок			
0	35	1,65	Не менее 72

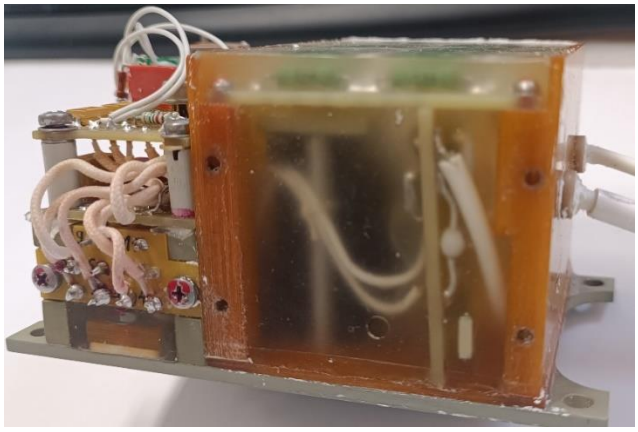


Рис. 2. Узел ВИП, залитый компаундом с астраленами, после термоциклов.

Из рис.2 видно, что трещины в компаунде отсутствуют. Полученные положительные результаты позволяют рассчитывать на повышение надежности ВИП и существенное увеличение процента годных узлов с первого предъявления.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Апин М. П., Данилов А. Б., Калистратов Н. А., Кириченко Д. И., Кузюткин С. И., Нефёдов С. А., Рафалович А. Д., Сенчуров В. А., Шалаев П. Д. Разработка и создание комплексированных СВЧ-устройств в АО «НПП „Алмаз“». Радиотехника, 2019, т. 83, № 8 (12), с. 6–14.
2. Гуняев Г. М., Каблов Е. Н., Ильченко С. И. Наномодифицированные углепластики с повышенной вязкостью разрушения. Труды ТПКММ-2006. Москва: Знание, 2006, с. 88–98.
3. Юдович В. М., Морозова С. Е., Юдович М. Е., Тойкка А. М., Пономарёв А. Н. Физико-механические и мембранные свойства наномодифицированного композита эпоксиноволачная смола – астрален. Вестник СПбГУ. Серия 4: Физика, химия, 2010, вып. 3, с. 82–90.

Модификация электрода нейроинтерфейса методом лазерной абляции и нанесение гибридного углерод-биополимерного покрытия

Савельев М.С.[1], ***Круковский Н.С.***[1], ***Мурашко Д.Т.***[1], ***Герасименко А.Ю.***[1,2]

e-mail: savelyev@bms.zone

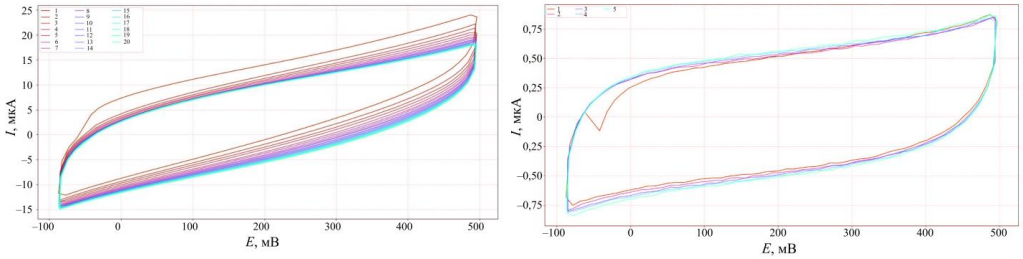
[1]*Институт биомедицинских систем, Национальный исследовательский университет «МИЭТ», Москва, Зеленоград, Россия*

[2]*Институт бионических технологий и инжиниринга, Первый Московский государственный медицинский университет им. И. М. Сеченова, Москва, Россия*

Ключевой научно-технической задачей в области нейроинженерии является разработка электродов для нейростимуляторов с увеличенным сроком эксплуатации. Такие электроды представляют собой критически важный компонент систем нейростимуляции, применяемых в терапевтических целях. Это требование обусловлено необходимостью продолжительных терапевтических курсов нейростимуляции, когда требуется имплантация нейростимулятора. Такая ситуация характерна при реабилитации пациентов с повреждениями нервной системы, синдромами хронической боли и нарушениями мышечной иннервации. Ранее нами предложен состав фотоотверждаемого гибридного углерод-биополимерного покрытия [1], применение которого позволяет преодолеть механическое несоответствие на границе раздела биологическая ткань–электрод и может служить в качестве нейроинтерфейса.

В настоящей работе уделяется внимание увеличению адгезии между поверхностью электрода и фотоотвержденным гибридным углерод-биополимерным покрытием, а также контролированию электрофизических свойств. В качестве подложки имитирующей поверхность электрода выбрана сталь 12Х18Н10Т. Состав разработанного ранне гибридного углерод-биополимерного композиционного покрытия [1] включал в себя следующие материалы: одностенные углеродные нанотрубки (ОУНТ) 0,02 мг/мл, восстановленный оксид графена (вОГ) 0,07 мг/мл, бычий сывороточный альбумин (БСА) 49,2 мг/мл, эозин Y 0,6 мг/мл, хитозан 19,7 мг/мл и коллаген 24,6 мг/мл.

На рис. 1а представлены результаты циклической вольтамперометрии, полученные для образца медицинской стали марки 12Х18Н10Т. Образец имел геометрические размеры 20×10×0,5 мм³ и использовался в качестве контрольного образца №1 без предварительной модификации поверхности. Модификация поверхности стальной пластины осуществлялась методом лазерной абляции с использованием импульсного лазерного излучения мощностью 4,3 Вт HTTP MARK MOPA (КБ «Булат», г. Зеленоград, Россия). В результате воздействия лазерного излучения на поверхности образца происходило формирование микромасштабных структур. Высота образовавшихся массивов варьировалась в диапазоне от 30 до 50 мкм. На модифицированную лазером поверхность наносился слой водной дисперсной среды, содержащей гибридный углерод-биополимерный материал. Фотоотверждение нанесенного покрытия проводилось в импульсном режиме с использованием лазерного излучения следующих параметров: длина волны 1070 нм; длительность импульса 100 нс; частота повторения импульсов 30 кГц и энергия одиночного импульса 100 мкДж. Для обеспечения равномерной обработки поверхности использовалась оптическая система с широкоугольным объективом, позволяющая осуществлять обработку значительных площадей. В каждой точке обработки лазерный луч фокусировался в пятно диаметром 19 мкм. канирующая система обеспечивала перемещение лазерного излучения по поверхности со скоростью 240 мм/с. При указанной скорости сканирования и частоте повторения импульсов 30 кГц достигалось непрерывное облучение фотополимеризуемого участка с равномерным распределением экспозиции лазерного излучения по всей площади. На рис. 1б приведены данные для циклической вольтамперометрии для образца №2, представляющего собой подложку из стали марки 12Х18Н10Т модицированную методом лазерной абляции с фотоотвержденным гибридным углерод-биополимерным покрытием.



(а) (б)

Рис. 1. Результаты циклической вольтамперометрии: контрольный образец №1 (а), модифицированный образец №2 (б). В легенде указан номер цикла.

По полученным кривым определены значения удельной емкости при скорости развертки 100 мВ/с и площади электрода 200 мм^2 в соответствии с формулой [2]:

$$C = \frac{1}{\nu S \Delta V} \int I dV \,. \quad (1)$$

где C – удельная емкость (Ф/м²); I – ток (А); V – потенциал (В); ΔV – окно напряжения (В); ν – скорость сканирования (В/с); S – площадь электрода (м²).

Измеренные значения удельной ёмкости составили 66,7 мкФ/см² для модифицированного образца №2 и 4,8 мкФ/см² для контрольного образца №1. Полученные данные демонстрируют 14-кратное увеличение ёмкости, что свидетельствует о высокой эффективности предложенного метода модификации поверхности электродов. Применение гидрофильного гибридного углерод-биополимерного покрытия на предварительно аблированной поверхности электрода обеспечивает: улучшение электрофизических свойств; отсутствие отслоения покрытия благодаря предварительной обработке поверхности; сохранение целостности покрытия в процессе эксплуатации. Все это указывает на возможность модификации электродов в составе нейроинтерфейса для длительного применения.

Финансирование: Работа выполнена в рамках крупного научного проекта Министерства науки и высшего образования Российской Федерации, Соглашение No 075-15-2024-555 от 25 апреля 2024 года.

Благодарности: Работа выполнена с использованием оборудования Центра коллективного пользования «Центр лазерных технологий в медицине» при поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (Соглашение № 075-15-2025-669 от 05 августа 2025 г.)

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Savelyev M., Kuksin A., Murashko D., Otsupko E., Suchkova V., Efremova K., Vasilevsky P., Kurilova U., Selishchev S. Effect of Ultrasonic Treatment of Dispersed Carbon Nanocomposite Media on the Formation, Electrical Conductivity, and Degradation of a Hydrogel for Metallic Stimulation Electrodes. Gels, 2025, vol. 11, P. 1004.

2. Kong M., Wang Z., Wang W., Ma M., Liu D., Hao S., Kong R., Du G., Asiri A.M., Yao Y., Sun X. NiCoP Nanoarray: A Superior Pseudocapacitor Electrode with High Areal Capacitance. Chemistry – A European Journal, 2017, vol. 23, P. 4435.

Углеродные наноструктуры в современных устройствах хранения энергии

Савилов С.В.[1], ***Архипова Е.А.***[1], ***Иванов А.С.***[1]

e-mail: savilov@chem.msu.ru
[1]*ФГБОУ ВО «Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова», Москва, Россия*

В условиях возрастающего спроса на энергоресурсы возобновляемые источники энергии становятся успешной альтернативой традиционной энергетике, основанной, преимущественно, на ископаемом топливе. Суперконденсаторы (СК), сочетающие высокую удельную мощность, быстрый заряд/разряд и превосходную стабильность при циклировании, рассматриваются как перспективные устройства хранения и преобразования энергии. Наибольшее же распространение получили литий аккумуляторы (ЛБ), хотя уже сейчас натрий-ионные системы развиваются опережающими темпами из-за фактора цены и безопасности. Во многих случая СК и ЛБ дополняют возможности друг друга при использовании в конечных устройствах.

Поскольку количество запасенной электрической энергии определяется ёмкостью и напряжением, в частности, для СК, сушественного повышения этого параметра может быть достигнуто либо за счет увеличения микро-и мезопористости углеродного материала, либо за счет расширения рабочего окна напряжения электролита. Таким образом, в докладе рассмотрены различные типы углеродных наноструктур: от квантовых точек до т.н. графеновых пен, в т.ч. гетерозамещенные атомами бора и азота, что позволяет варьировать их электронную емкость и кислотно-основные свойства поверхности, что важно для обеспечения сродства к электролиту. Сделан акцент на получении всех указанных наноструктур в рамках единой аппаратной базы пиролизом углеводородного сырья. Стоит отметить, что характерной чертой большинства УНС является их квазимолекулярный характер. Высокая доля поверхностных атомов и наличие дефектов – неотъемлемых атрибутов твердых кристаллических материалов – обусловливает появление стабилизирующих структуру поверхностных групп, число которых, хотя и зависит от методики синтеза, с высокой точностью поддается аналитическому определению несколькими независимыми методами и контролю в рамках выбранной методики получения.

В работе также представлен критический анализ жидких и гель-полимерных электролитов, в том числе модифицированных редокс-активными добавками, для применения в СК на основе описанных выше углеродных наноструктур. Показано, что введение таких добавок приводит к значительному росту удельной ёмкости и энергии устройства. Ключевым фактором, определяющим электропроводность и эксплуатационные характеристики СК, является концентрация редокс-соединений. Вместе с тем, высокая доля добавки может провоцировать усиленный саморазряд и блокировку пор электродного материала продуктами фарадеевских реакций, что снижает вклад двойнослойной ёмкости.

В докладе также приведены примеры реализации СК и ЛБ, где компоненты электродных масс и/или электролиты изготовлены из возобновляемого природного сырья, что особенно актуально в свете ориентации на биоэкономику.

Финансирование: работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (проект № 25-19-00263).

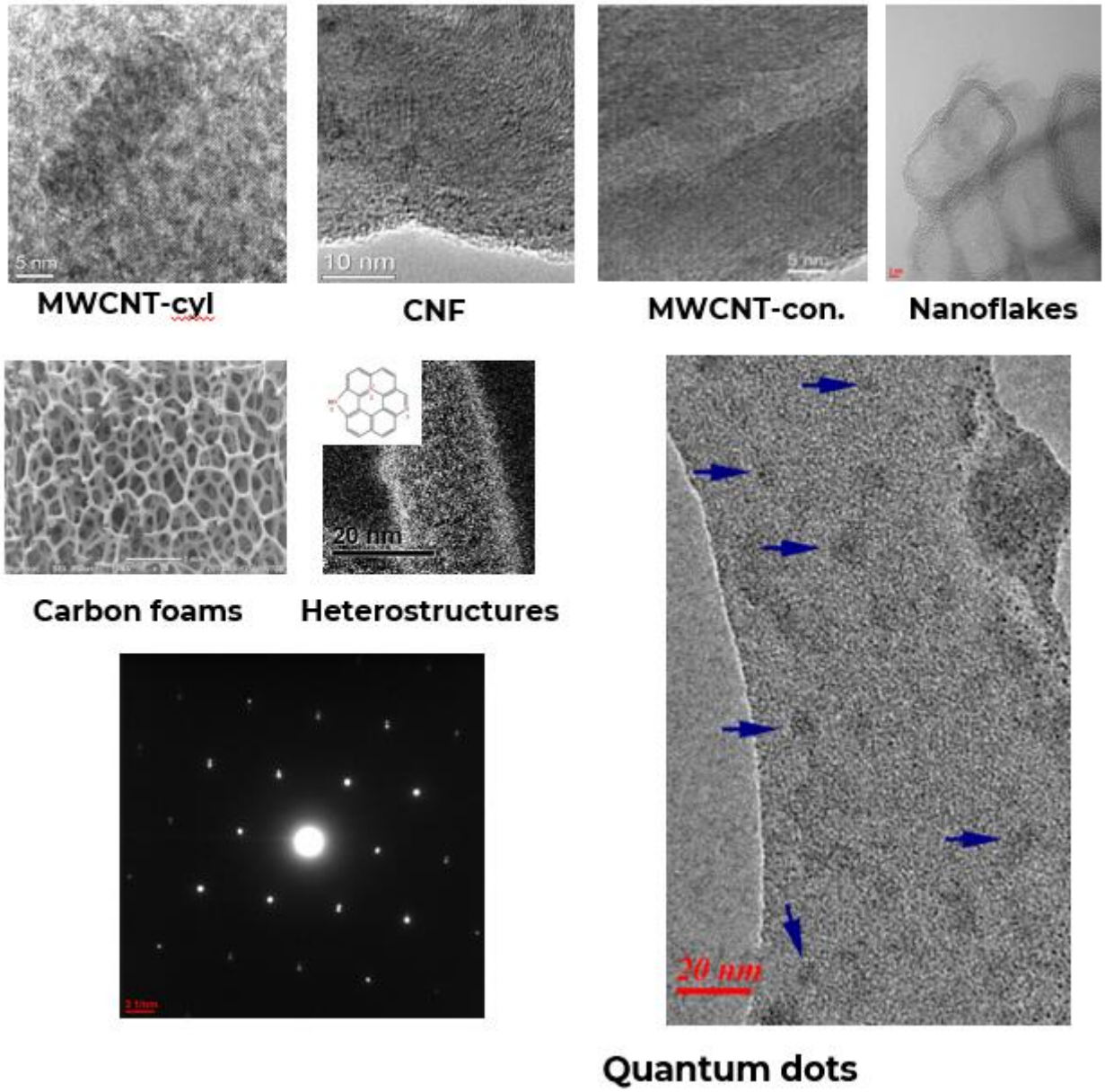


Рис.1. Углеродные наноструктуры для электрохимических устройств

Автоэмиссионные свойства катодов на основе ПАН-волокон и УНТ-нитей (для МФТИ)

Саи Тхвин Наинг Зо.[1], Шешин Е.П.[1]
e-mail: saithwinnaingzaw84@gmail.com
[1]МФТИ«Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)», Долгопрудный, Россия

Автоэлектронная эмиссия из углеродных материалов привлекает значительное внимание в связи с перспективами создания эффективных холодных катодов для вакуумной микро- и оптоэлектроники [1,2]. Среди различных углеродных структур волокна на основе полиакрилонитрила (ПАН) и нити, состоящие из углеродных нанотрубок (УНТ), представляют особый интерес благодаря сочетанию хорошей электропроводности, механической прочности и высокого отношения длины к диаметру, определяющего величину коэффициента усиления электрического поля [3].ПАН-волокна, получаемые карбонизацией полимерных прекурсоров, имеют развитую поверхность с множеством микровыступов, которые могут служить эмиссионными центрами [4]. Их преимуществом считается возможность получения стабильного эмиссионного тока за счет большого числа независимых эмиттеров. В свою очередь, УНТ-нити, формируемые из пучков нанотрубок, обладают уникальными характеристиками, связанными с нанометровыми размерами индивидуальных трубок и их высокой электропроводностью [5]. Теоретически это может обеспечивать более низкие пороговые поля и высокую плотность эмиссионного тока.

Исследовались два типа катодов: на основе УНТ-нити диаметром ~30-40 мкм (предоставлена ФГБНУ «ТИСНУМ», г. Троицк) и на основе пучка (~250 шт.) отдельных ПАН-волокон диаметром 5-7 мкм (предоставлены НИЦ «Углехимволокно»). Волокна закреплялись в обжатых никелевых трубках для обеспечения электрического контакта.

Измерения проводились в цельнометаллической вакуумной камере с безмасляной откачкой, обеспечивающей рабочее давление ~10^{-6} мм рт. ст. (рис. 1). В качестве анода использовалось стекло с проводящим ITO-слоем, покрытое зеленым катодолюминофором (длина волны излучения 520 нм). Высокое напряжение (до 3 кВ) подавалось от стабилизированного источника. Эмиссионный ток регистрировался путем измерения падения напряжения на калиброванном резисторе с помощью осциллографа. Через смотровое окно камеры фиксировалось изображение свечения люминофора для анализа площади и однородности эмиссии. Микроструктура образцов до и после испытаний изучалась с использованием растрового электронного микроскопа.

Сравнение вольт-амперных характеристик (рис. 2) выявило существенное различие в пороговых параметрах эмиссии. Напряжение, соответствующее началу автоэлектронной эмиссии (току ~1 мкА), для катода из УНТ-нити составило около 900 В, в то время как для катода из ПАН-волокон аналогичный ток наблюдался при напряжении около 2700 В. Таким образом, пороговое напряжение для УНТ-катода примерно в три раза ниже.

Кроме того, диапазон ускоряющих напряжений, необходимых для увеличения эмиссионного тока на порядок величины, для УНТ-нити оказался значительно уже, чем для ПАН-волокон. Это указывает на более однородное распределение коэффициентов усиления поля и работ выхода для эмиссионных центров на поверхности УНТ-материала.

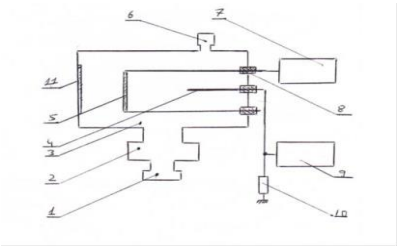


Рис.1.Схема экспериментальной установки катодов

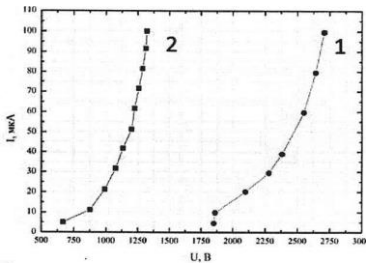


Рис. 2. Вольтамперные характеристики для катодов: полиакрилонитрильное волокно (ПАН-волокно) - кривая 1 и волокно из углеродных нанотрубок (УНТ-нить) - кривая 2.

Исследование зависимости эмиссионного тока от времени при фиксированных напряжениях показало принципиально различное поведение материалов (рис. 3, 4). При высоких постоянных напряжениях (~1380 В для УНТ, ~2345 В для ПАН) ток УНТ-катода возрастал и затем стабилизировался, в то время как ток ПАН-катода достигал максимума с последующей деградацией. Это принципиальное различие связано с радикально различной структурной эволюцией материалов в процессе работы.



Рис. 3. Зависимость тока от времени для для катода из УНТ-нити при разных анодных напряжениях.

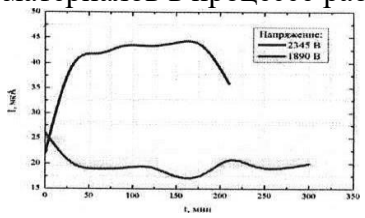


Рис. 4. Зависимость тока от времени катода из ПАН-волокон при разных анодных напряжениях

Проведенное сравнительное исследование демонстрирует, что углеродные волокна на основе нанотрубок обладают превосходящими автоэмиссионными свойствами по сравнению с традиционными ПАН-волокнами для применения в катодах. УНТ-катод работает при существенно более низком пороговом напряжении (~в 3 раза), обеспечивает более высокий и стабильный эмиссионный ток в условиях высоковольтной нагрузки и возбуждает большую и более яркую площадь люминофора.Таким образом, нити на основе углеродных нанотрубок идентифицированы как наиболее перспективный материал для разработки эффективных, стабильных и низковольтных автоэмиссионных катодов для устройств вакуумной электроники следующего поколения, включая источники света и электронные пушки.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Egorov N. V., Sheshin E. P. Carbon-Based Field Emitters: Properties and Applications. In: Gaertner G., Knapp W., Forbes R. G. (eds.) Modern Developments in Vacuum Electron Sources. Cham: Springer International Publishing, 2020, pp. 449–528.

2. Dwivedi N., Dhand C., Anderson E. C. et al. The Rise of Carbon Materials for Field Emission. Journal of Materials Chemistry C, Royal Society of Chemistry, 2021, vol. 9, № 8, pp. 2620–2659.

3. Елецкий А. В. Углеродные нанотрубки и их эмиссионные свойства. Успехи физических наук, 2002, т. 172, № 4, с. 436–438.

4. Qin X., Lu Y., Xiao H., Wen Y., Yu T. A Comparison of the Effect of Graphitization on Microstructures and Properties of Polyacrylonitrile and Mesophase Pitch-Based Carbon Fibers. Carbon, New York: Elsevier Ltd, 2012, vol. 9, № 12, pp. 4459–4469.

5. Saito Y., Uemura S., Hamaguchi K. Cathode Ray Tube Lighting Elements with Carbon Nanotube Field Emitters. Japanese Journal of Applied Physics, 1998, vol. 37, pp. 346–348

Молекулярно-динамическое моделирование термоиндуцированного воздействия в наночастицах Cu-Pt-Pd

Колосов А.Ю.[1]***, Соколов Д.Н.***[1]***, Непша Н.И.***[1]***, Митинев Е.С.***[1]***, Сдобняков Н.Ю.***[1]

e-mail: nsdobnyakov@mail.ru
[1]*ФГБОУ ВО «Тверской государственный университет», Тверь, Россия*

Многокомпонентные металлические наночастицы имеют широкие возможности по модифицированию (композиция, форма, морфология, размерный эффект) [1, 2]. Вместе с тем, остается ряд открытых вопросов в частности описание возможных структурных мотивов, доминирования того или иного локального окружения. В данной работе для молекулярно-динамического (МД) моделирования использовались исходные конфигурации наноструктур $Pt_{1700}Pd_{1700}Cu_{5100}$ с однородными начальными распределениями. Начальные конфигурации с ГЦК структурой подвергались кратковременной релаксации (отжигались) при 300 К в течение 0,2 нс и затем нагревались до 2000 К в течение 5 и 10 нс. Выбранная конечная температура заведомо превышает температуру плавления наночастиц. Затем нанокапли охлаждались до исходной температуры 300 К, что приводило к их затвердеванию. После завершения МД экспериментов анализировались конечные конфигурации (рис. 1). Установлено, что структурная сегрегация отвечала формированию слоистых (полосовых) структур.

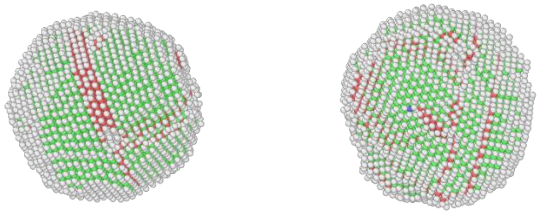


Рис. 1. Объемный вид конечных конфигурация при 300 К. Слева – цикл 1 (10 нс), Справа – цикл 2 (5 нс). К системе применен CNA анализ [6], зеленые атомы – ГЦК, красные атомы – ГПУ, синие – ОЦК, белые – нераспознанные.

Финансирование: Работа выполнена при финансовой поддержке Минобрнауки РФ в рамках государственного задания в сфере научной деятельности (проект № 0817-2026-0006).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Сдобняков Н. Ю. Моделирование структурных превращений в однокомпонентных и многокомпонентных металлических наносистемах: учебник. Тверь: ТвГУ, 2025, 408 с.

2. Сдобняков Н. Ю., Самсонов В. М., Серов С. В. и др. Атомистическое моделирование термоиндуцированных структурных превращений в четырёхкомпонентных наносплавах Cu–Au–Pt–Pd с различной морфологией. Коллоидный журнал, 2025, т. 87, № 4, с. 415–428.

3. Polak W. Z. Efficiency in Identification of Internal Structure in Simulated Monoatomic Clusters: Comparison between Common Neighbor Analysis and Coordination Polyhedron Method. Computational Materials Science, 2022, vol. 201, p. 110882.

Исследование взаимодействия функционалированных атомом золота унт (6,0) и (6,6) с молекулами ацетона и углекислого газа

***Сергеев Д.Ф.*[1 2], *Борознина Н.П.*[1], *Запороцкова И.В.*[1]**

e-mail: khtnmma-231_327882@volsu.ru
[1]*ФГАОУ ВО «Волгоградский Государственный Университет», Волгоград*
[2]*АО «ВНИКТИнефтехимоборудование», Волгоград*

Высокая чувствительность устройств предназначенных для обнаружения вредных веществ, к которым относится ацетон и углекислый газ, с учетом низких рабочих температур, имеет большое значение из-за их возможного вреда для здоровья человека и окружающей среды [1, 2]. Также стоит отметить, что данные вещества могут присутствовать и в выдыхаемом человеком воздухе. При этом повышенный уровень некоторых из них может свидетельствовать о наличии различного рода заболеваний, например, в случае ацетона, о сахарном диабете [2, 3].

Учитывая вышеизложенное следует обратить особое внимание на функционализированные углеродные нанотрубки (УНТ), поскольку таким способом удалось не только сохранить изначальные достоинства УНТ, но и улучшить некоторые из них, отвечающие за качественную адсорбцию, а также уменьшить существующие недостатки, по типу невысокой селективности [4,5].

Исследование влияния функционализации атомом золота (Au) на сенсорные свойства УНТ типа (6,0) и (6,6) в отношении молекул ацетона и углекислого газа происходило на смоделированных комплексах, которые были получены и чьи параметры были определены ранее. Расстояние взаимодействия атома Au с самым вероятным центром адсорбции на поверхности УНТ (6,0) соответствовало 0,23 нм, а для УНТ (6,6) оно соответствовало 0,32 нм.

Ширина запрещенной зоны (ШЗЗ) смоделированных систем равнялась 0,59 эВ для УНТ типа (6,0) и 0,43 эВ для УНТ типа (6,6).

Анализ взаимодействия системы “УНТ + атом золота” с молекулой ацетона.

С помощью данных, полученных после проведения квантово-химических расчетов, были построены графики зависимости энергии системы от расстояния молекулы ацетона до атома золота, благодаря которым стало возможно определить энергетические минимумы, указывающие на стабильность смоделированных комплексов. Молекула ацетона приближалась к атому золота адсорбционным центром, которым являлся атом кислорода (рис. 1)

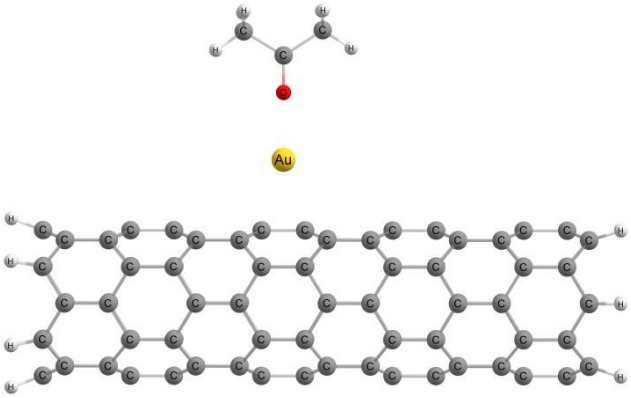


Рис. 1 Система “УНТ + Au типа (6,0)” с присоединенной молекулой ацетона

Функционализация двух исследуемых типов УНТ атомом золота улучшает их сорбционные свойства в отношении молекулы C_3H_6O, создавая дополнительные зоны для

процесса адсорбции. Анализ полученных данных свидетельствует об устойчивости созданных комплексов, что указывает на возможность применения таких материалов.

Анализ изменений ШЗЗ показал, что у смоделированных систем “УНТ + Au” при присоединении молекулы C_3H_6O значение ΔEg увеличивается до 0,63 эВ в случае УНТ (6,0) и до 0,91 эВ в случае УНТ (6,6).

Анализ взаимодействия системы “УНТ + атом золота” с молекулой углекислого газа.

С учетом полученных данных, приближение молекулы углекислого газа к атому золота происходило атомом кислорода в случае УНТ (6,0) и атомом углерода в случае УНТ (6,6).

После проведения функционализации двух исследуемых типов УНТ атомом золота наблюдается образование устойчивых комплексов с молекулой углекислого газа, при этом в случае УНТ (6,6) можно заметить появление дополнительных зон адсорбции. Анализ полученных данных свидетельствует об возможности применения таких материалов.

Анализ изменений ШЗЗ показал, что у смоделированных систем “УНТ + Au” при присоединении молекулы CO_2 значение ΔEg уменьшается до 0,57 эВ в случае УНТ (6,0) и до 0,39 эВ в случае УНТ (6,6).

Заключение

Выполненное исследование по определению влияния функционализации атомом золота на сенсорные свойства УНТ типа (6,0) и (6,6) в отношении молекул ацетона и углекислого газа демонстрирует стабильность смоделированных комплексов, при этом показатели энергии данных комплексов соответствуют слабому Ван-дер-Ваальсовому взаимодействию, что указывает на возможную перспективу их многократного применения.

При взаимодействии систем “УНТ типа (6,0) и (6,6) + атом золота” с молекулами ацетона и углекислого газа наблюдается изменение ширины запрещенной зоны, что указывает на высокую чувствительность смоделированных систем. А также следует отметить, что во всех анализируемых случаях полученные значения ширины запрещенной зоны имеют отличия, что указывает на селективность смоделированных сенсоров в отношении данных веществ.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Salimian F., Hemmati A., Ghaemi A. A Review of Nanostructured Carbon Dioxide Sensors Based on Electrical and Thermal Conductivity. Results in Engineering, 2025, vol. 26, p. 105633.

2. Yang L. et al. Silver Nanoparticle Functionalized Heterojunction NiO/SnO_2 Nanotubes for Comprehensive Sensitization of Acetone Sensor. Sensors and Actuators B: Chemical, 2024, vol. 417, p. 136208.

3. Salehi S. et al. Highly Sensitive Carbon Nanotubes–SnO_2 Nanocomposite Sensor for Acetone Detection in Diabetes Mellitus Breath. Sensors and Actuators B: Chemical, 2014, vol. 205, pp. 261–267.

4. Ngana O. C. et al. Computational Design of Metal-Doped Carbon Nanotubes as Sensors for Carbonyl Sulfide: Implication for Environmental Gas Monitoring. Next Materials, 2026, vol. 11, p. 101885.

5. Timsorn K. et al. Metal/Metal Oxide Nanoparticles Decorated Carbon Nanomaterials-Based Gas Sensors: A Review. Micro and Nanostructures, 2025, p. 208406.

Моделирование взаимодействия дисульфида молибдена с латентными следами рук

***Сердюкова Д.С.*[1], *Ермакова Т.А* [1], *Васильев В.А.*[2]**

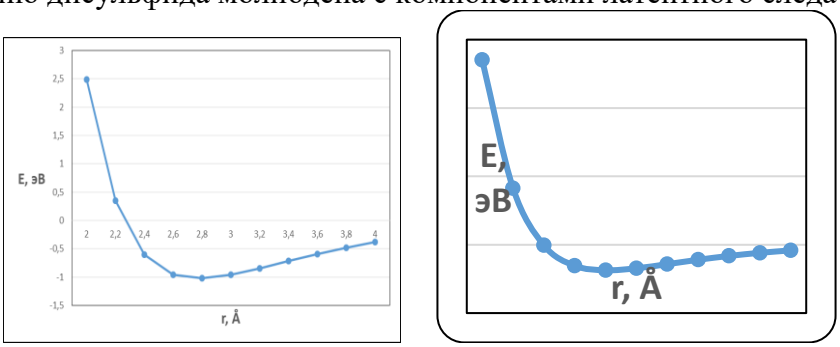
e-mail: taermakova09@mail.ru

[1]*Волгоградский государственный университет, 400062, Волгоград, пр. Университетский, 100*

[2]*Волгоградская академия МВД России, 400089, Россия, г. Волгоград, ул. Историческая, 130*

В настоящее время особую значимость приобретают разработки отечественных материалов в различных отраслях экономики. Исследование взаимодействия физических проявителей с потожировыми веществами рук способствует созданию эффективных составов SPR реагентов для выявления латентных следов рук [1-4]. В разработанную среду на основе дисульфид молибдена включили дополнительные компоненты, способствующие стабилизации коллоидной системы, и повышающие качество выявления папиллярных узоров следов рук на различных поверхностях [5]. Процесс следообразования при контакте пальцев рук с влажной поверхностью предметов с образованием потожирового следа возможен благодаря выделению сальных и потовых желез, в состав которых входят различные компоненты - жирные кислоты, эфиры холестерина, углеводороды, свободный холестерин, глицерин, сквален, мочевина, мочевая кислота, аммиак, аминокислоты, креатинин и др.

Для исследования сорбционного взаимодействия между компонентами потожирового следа и дисульфидом молибдена проведены квантово-химические расчеты с помощью применения метода теории функционала плотности DFT с гибридным функционалом B3LYP и базисным набором 6-31G(d) программы Gaussian. Для квантово-химического моделирования были выбраны такие компоненты потожирового следа, как аланин, серин, лизин, цистеин, мочевина, липиды и стероиды (холестерин, холестерилстеарат, пальмитат цетила, 1-стеароил-глицерин, фосфатидилхолин). Примеры поверхностей энергий взаимодействия дисульфида молибдена с молекулами цистеина, холестерина представлены на рисунках 1-2. Профили поверхностей потенциальных энергий взаимодействия дисульфида молибдена с молекулами потожирового следа показали минимумы, которые подтверждают химическую сорбцию дисульфида молибдена с компонентами латентного следа рук.



а б

Рис. 1. Профиль поверхности потенциальных энергий взаимодействия молекул цистеина (а), холестерина (б) с дисульфидом молибдена

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ:

1. Васильев В. А., Ермакова Т. А., Дружинин Ю. А., Афанасьев И. Б. Проблемные аспекты разработки технико-криминалистических средств выявления следов рук, подвергшихся воздействию влаги / Судебная экспертиза: российский и международный опыт

: материалы VII Международной научно-практической конференции, Волгоград, 25–26 апреля 2024. – с. 39-42

2. Васильев В. А., Дружинин Ю. А., Афанасьев И. Б., Чешева М. Ф. О некоторых аспектах разработки и применения дисперсной системы для выявления следов рук, подвергшихся воздействию влаги Судебная экспертиза / Forensic examination. Выпуск 3 (67) 2021 : научно-практический журнал. – Волгоград : ВА МВД России, 2021. – с. 104-115

3. Рыбачок Н.С., Ермакова Т.А., Васильев В.А. Моделирование механизмов взаимодействия дисульфида молибдена с латентными следами рук/ Сборник тезисов V Международной научно-технической конференции «Нанотехнологии и наноматериалы: современное состояние и перспективы развития». - Волгоград, 2025. - с. 98-99.

4. Ермакова Т.А., Васильев В.А., Афанасьев И.Б., Дружинин Ю.А., Юдина Т.Ю., Способ получения дисперсной среды для выявления следов рук, подвергшихся воздействию влаги / Патент РФ № 2699570, A61B5/1172. Опубликовано 06.09.2019. Бюл. № 25.

Исследование процесса поверхностного модифицирования углеродных нанотрубок оксидом олова

Сизоненко В.В.[1], ***Борознин С.В.***[1], ***Кислова Т.В.***[1], ***Смирнов К.О.***[1]

e-mail: FNa-251_582881@volsu.ru
[1]*ФГАОУ ВО «Волгоградский государственный университет», Волгоград, Россия*

Углеродные нанотрубки (далее - УНТ) благодаря своим уникальным физическим и химеческим свойствам представляют большой перечень возможных вариаций, видов и направлений их примирения, именно из-за этого УНТ в качестве объекта исследования обладают большой привлекательностью. В зависимости от своего строения, количества, типа и расположения атомов в структруре УНТ, меняются различные механические, электрические и оптические свойства. Существует множество видов УНТ, среди которых можно выделить боросодержащие углеродные нанотрубки (далее – БУНТ), они интересны тем, что по своим свойствам бор близок к углероду, имеют схожие заряды и число электронов на атомных орбиталях, одинаковые атомные радиусы и при замене углерода на бор, электронная конфигурация практически остается неизменной[1,2], также можно реализовать В УНТ с примесными замещающими атомами бора проводимость типов(p или n), такая возможность появляется из-за небольшой разности в свойствах материала. Целью данной работы является изучения сорбционных свойств бороуглеродных нанотрубок. На основании проведенных исследований можно сделать вывод о сорбционном взаимодействии с поверхностью боросодержащих нанотрубок атомов кислорода, хлора и фтора.

В качестве объекта исследования были выбраны бороуглеродные нанотрубки BC5 типа зигзаг с индексами хиральности (6.0). Был построен соответствующий кластер БУНТ, данный кластер содержит: 108 атомов: 71 атомов углерода, 24 атома бора и 12 атомов водорода. Границы кластера замыкались псевдоатомами водорода для бесконечного продолжения структуры. Для осуществления теоретических расчетов присоединения атомов к поверхности был выбран метод теории функционала плотности (англ. Density Functional Theory, DFT) [3]. В качестве функционала был выбран B3LYP [4], он является гибридным функционалом, который комбинирует различные компоненты для описания обменно-корреляционной энергии электронов в системе. После построения кластера была проведена его оптимизация. Было проведено пошаговое приближения трех атомов газовой фазы с шагом 0,2 ангстремам к поверхности БУНТ, изначальное расстояние равнялось 4 ангстремам. В качестве места приближения был выбран центр кластера, это сделано с той целью, чтобы избежать появления краевых эффектов.

В ходе работы были получены профили поверхностей потенциальной энергии (далее - ППЭ) (рис 1), благодаря им можно судить о наличии адсорбционного взаимодействия и стабильности получившегося комплекса. В результате удалось установить, что в случае присоединения кислорода к поверхности БУНТ, он лучше всего адсорбируется к атому углерода. В случае фтора, присоединения лучше всего происходит, наоборот, с атомом бора. Хлор лучше всего адсорбируется к бору, однако разница в энергиях небольшая.

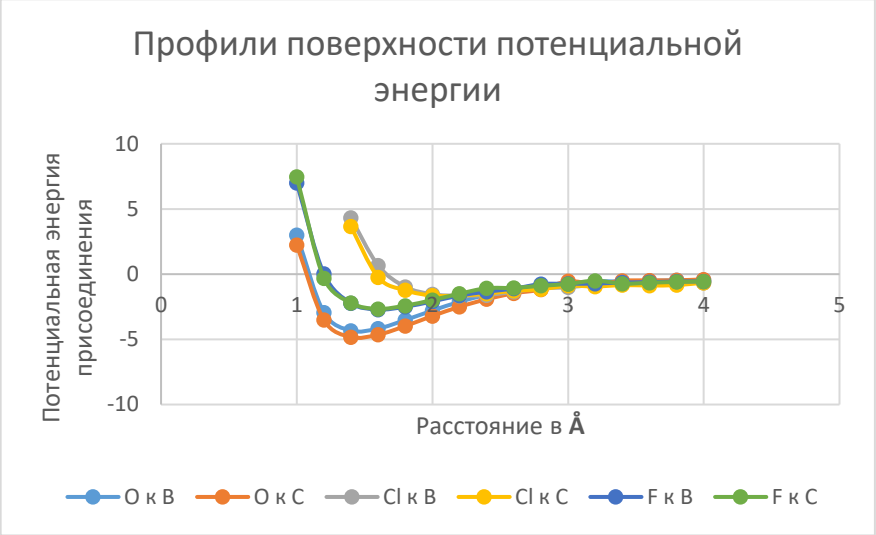


Рис.1. Профили поверхности потенциалной энергии рассматриваемых структур.

Установлено, что лучше всего адсорбируется атом O, его потенциальная энергия составила -4.82 эВ при присоединении к атому C и -4.33 эВ при присоединении к B. Хуже всего адсорбцию показал атом Cl, его потенциальная энергия составила -1.64 к атому C, и -1.65 к атому B. Более подробные данные представлены в таблице 1.

Таблица 1. Основные характеристики рассмотриваемых структур

Атом	**R_a, Å**	**E_a, eV**
O к B	1.4	-4.33
O к C	1.4	-4.82
F к B	1.6	-2.71
F к C	1.6	-2.65
Cl к B	2.2	-1.65
Cl к C	2.2	-1.64

Было установлено, что в случае присоеднинения кислорода и фтора адсорбция является физической, а в случае хлора химическая. Это видно, исходя, из расстояния адсорбции

В данной работе, в соотвествии с поставленной целью, были исследованы основные энергетические взаимодействия между боросодержашей нанотрубкой и атомами газовой фазы. Полученные результаты могут быть полезны для разработки защитных поверхностей и фильтрах от вредных газах.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Li X. et al. Structural and Electronic Properties Study on B-N Co-Doped (8,0) Single-Walled Carbon Nanotubes. Solid State Communications, 2016, vol. 227, pp. 1–6

2. Xia K. et al. Tensile Properties of a Boron/Nitrogen-Doped Carbon Nanotube–Graphene Hybrid Structure. Nanoscale Research Letters, 2014, vol. 9, p. 167 (PMC3999831).

3. Сатанин А. М. Введение в теорию функционала плотности: учебно-методическое пособие. Нижний Новгород: Нижегородский государственный университет им. Н. И. Лобачевского, 2009, 64 с.

4. Mardirossian N., Head-Gordon M. Thirty Years of Density Functional Theory in Computational Chemistry: An Overview and Extensive Assessment of 200 Density Functionals. Molecular Physics, 2017, vol. 115, № 15–16, pp. 2315–2372.Получение углеродных наноструктур плазмохимическими методами

Получение углеродных наноструктур плазмохимическими методами

Смовж Д.В.[1], ***Скирда М.С.***[1]

e-mail: smovzh@itp.nsc.ru
ФГБУН Институт теплофизики им.С.С.Кутателадзе, Новосибирск, Россия

Высокоориентированный пиролитический графит (HOPG), УНТ, ВОГ, графит и композитные материалы на основе углерода и металлов/оксидов металлов нашли широкое применение в электрохимических источниках тока, в частности, в суперконденсаторах и Li-ионных аккумуляторах. В настоящее время прогресс в развитии электродных композитов для ХИТ заключается в разработках масштабируемых способов получения композитов на основе металлов (полупроводников), с высокой электрохимической емкостью, с графитоподобными материалами или аморфной углеродной матрицей с заданным дизайном. К таким композитам относятся наночастицы диспергированные в углероде, в том числе со структурой ядро-оболочка. В литературе представлены различные подходы к формированию подобных композитных материалов, это технологии одностадийного синтеза и последовательного смешения компонент. Таким образом, задача может быть разделена на подзадачи: разработка одностадийных технологий синтеза, развитие способа получения углеродной сажи с заданными параметрами (доля sp2/sp3, электропроводность), синтез наночастиц/нанослоев элемента добавки. Плазмохимические методы являются перспективными методами получения наноуглеродных материалов в промышленных объемах. Одним из преимуществ плазменных методов является возможность в широких пределах изменять прекурсоры для производства наноуглерода и гибкое управление параметрами синтеза. К недостаткам технологий относится сложность обеспечения селективности по продуктам синтеза и необходимость использования газов разбавителей. Настоящая работа посвящена получению углеродных наноматериалов при конверсии метана для применения в ХИТ.

Плазменная конверсия углеводородов производилась в струйном плазмотроне с использованием в качестве углеводорода метана. Целью работ являлось проведение поисковых исследований, и создание научно-технического задела для разработки технологии утилизации попутного нефтяного газа путем конверсии в наноструктурированную углеродную сажу. Для конверсии применялся модифицированный плазмотрон типа ЭДП 104 с графитовыми электродами. Использовался чистый метан и смеси с азотом/водородом. Расход по газовой смеси от 30 до 80 н.л./мин. Ток плазмотрона до 200А. Мощность до 50кВт. Трубчатый реактор (камера дожига), оснащена контуром охлаждения и графитовой футеровкой. Анализ материалов проводился методами СЭМ, КР, ТГА, РФА. Показано, что продуктами синтеза является наноструктурированный углерод с различной электропроводностью. На основе данных материалов были получены эффективные сорбенты для органических загрязнений и углеродные добавки для литий-ионных аккумуляторов, с параметрами соответствующими зарубежным коммерческим аналогам.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (грант № 075-15-2025-572)»

Влияние вакансий на адсорбцию органических молекул на однослойном карбиде кремния

Созыкин С.А.[1], ***Барташевич Е.В.***[1]

e-mail: sozykinaer@susu.ru
[1]*ФГАОУ ВО «Южно-Уральский государственный университет», Челябинск, Россия*

Двумерные материалы привлекают значительное внимание благодаря высокой удельной поверхности, необычным электронным свойствам и возможности направленной модификации структуры. Управление их характеристиками может осуществляться за счет введения примесей и дефектов, что делает такие системы перспективными для применения в сенсорике, катализе и наноэлектронике.

Наиболее известным представителем двумерных материалов является графен, обладающий высокой проводимостью и механической прочностью. Однако его химическая инертность приводит к тому, что взаимодействие с большинством молекул определяется главным образом слабыми ван-дер-ваальсовыми и π–π-взаимодействиями, что ограничивает эффективность графеновых адсорбционных систем.

Альтернативой графену может служить однослойный карбид кремния, обладающий более высокой химической активностью и широкой запрещенной зоной [1]. Существенное влияние на реакционную способность таких поверхностей оказывают точечные дефекты, прежде всего вакансии [2], формирующие локальные центры повышенной химической активности и способные усиливать адсорбцию молекул [3].

Особый интерес представляют органические соединения с выраженными донорно-акцепторными свойствами, такие как силатраны и их производные, обладающие гипервалентной связью Si–N и высокой поляризуемостью. Эти молекулы широко применяются для модификации твердых поверхностей и формирования гибридных органо-неорганических систем.

В настоящей работе методом квантово-химического моделирования исследовано влияние вакансий на адсорбцию ряда органических молекул на бездефектных и дефектных монослоях карбида кремния.

В качестве адсорбирующих поверхностей рассматривались двумерные модели гексагонального карбида кремния (h-SiC) и 25% Si-допированного графена с мета-расположением атомов кремния (m-SiC). Каждая расчетная ячейка содержала 120 атомов C и Si. Моделировалась адсорбция фтор- и метокси-производных силатрана, 4,4′-диаминодифенилацетилена и 3-аминопропилтриэтоксисилана на бездефектных поверхностях и поверхностях с вакансиями.

Энергия адсорбции определялась как разность энергии системы «поверхность – молекула» и суммы энергий изолированной поверхности и изолированной молекулы, полученных с использованием программы SIESTA, реализующей теорию функционала плотности в подходе псевдопотенциала. Анализ электронной плотности проводился на основе полноэлектронных расчетов в пакете CRYSTAL17 в рамках подхода QTAIM с использованием программы TOPOND.

Показано, что кремний-углеродные системы в присутствии дефектов структуры могут проявлять магнитные свойства, отсутствующие в бездефектных системах. Это выражается в появлении областей с ненулевой разностью $\rho^{\alpha}(r)$-$\rho^{\beta}(r)$, которая часто локализуется на атомах углерода вблизи удаляемого атома кремния. В результате даже при уменьшении числа контактов между адсорбированной молекулой и поверхностью вследствие образования вакансии взаимодействие может усиливаться по сравнению с бездефектной системой.

Сопоставление энергий адсорбции различных молекул показывает, что наименьшая энергия связывания, независимо от наличия и типа вакансии в карбиде кремния, наблюдается для фторсилатрана. Несколько более сильное взаимодействие характерно для

метоксисилатрана, тогда как 4,4′-диаминодифенилацетилен и 3-аминопропилтриэтоксисилан образуют более стабильные адсорбционные комплексы. При этом лишь в отдельных случаях образование вакансии приводит к ослаблению взаимодействия молекулы с поверхностью.

Дополнительно установлено, что адсорбированная молекула может стабилизировать метастабильные конфигурации кремний-углеродной поверхности. Это обстоятельство следует учитывать при вычислении энергии адсорбции, поскольку в ряде случаев молекула взаимодействует не с равновесной поверхностью, а со структурой, обладающей более высокой энергией.

Показательным является случай адсорбции 3-аминопропилтриэтоксисилана. В двух из четырех рассмотренных ориентаций молекулы формируется очень сильное взаимодействие, близкое по характеру к ковалентному. Такая связь сохраняется даже при удалении любого атома из кремний-углеродной подложки.

Таким образом, результаты квантово-химического моделирования показывают, что введение вакансий в однослойный карбид кремния существенно влияет на характер адсорбции органических молекул. В большинстве случаев наличие дефекта приводит к усилению взаимодействия молекулы с поверхностью, что связано с появлением локальных центров повышенной реакционной способности и изменением электронной структуры системы. Установлено, что наибольшую прочность связывания среди рассмотренных соединений проявляют 4,4′-диаминодифенилацетилен и 3-аминопропилтриэтоксисилан, тогда как силатраны взаимодействуют с поверхностью слабее. Полученные результаты указывают на важную роль дефектов в регулировании адсорбционных свойств кремний-углеродных двумерных материалов.

Работа выполнена при финансовой поддрежке гранта РНФ 22-13-00170-П.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Polley C. M., Fedderwitz H., Balasubramanian T., Zakharov A. A., Yakimova R., Bäcke O., Ekman J., Dash S. P., Kubatkin S., Lara-Avila S. Bottom-Up Growth of Monolayer Honeycomb SiC. Physical Review Letters, 2023, vol. 130, p. 76203.

2. Bartashevich E. V., Sozykin S., Tsirelson V. G. Unraveling the Electronic Properties of Silicon Carbide Monolayers with Si/C Vacancies. Physical Chemistry Chemical Physics, 2025, vol. 27, p. 22520.

3. Nguyen P. M., Van Nguyen H., Lam V. T., Nhu Duong T. T., Chong T. V., Tran H. T. T. Ab Initio Investigation of the Hydrogen Interaction on Two-Dimensional Silicon Carbide. ACS Omega, 2022, vol. 7, pp. 47642–47649.

Температурная динамика Au25(SR)18: молекулярно-динамическое моделирование

Созыкина Е.Р.[1], ***Бескачко В.П.***[1]

e-mail: sozykinaer@susu.ru
[1]*ФГАОУ ВО «Южно-Уральский государственный университет», Челябинск, Россия*

Атомарно-точные золотые нанокластеры занимают промежуточное положение между отдельными атомами и металлическими наночастицами. Кластер $Au_{25}(SR)_{18}$ состоит из икосаэдрического ядра Au_{13}, окруженного шестью степлерными мотивами $Au_2(SR)_3$, образующими защитную тиолатную оболочку. Такая структура обеспечивает высокую термодинамическую стабильность и дискретную электронную структуру, описываемую суператомной моделью [1-3].

Несмотря на детальное изучение атомной и электронной структуры [2, 3], температурная динамика кластера $Au_{25}(SR)_{18}$, включая ангармонические эффекты, коллективные моды и возможные структурные перестройки, исследована недостаточно. Известно, что лигандная оболочка существенно повышает термостабильность Au_{25} по сравнению с незащищенными кластерами, а структурные переходы в защищенных системах происходят в диапазоне ~580–760 K [4].

Большинство ab-initio молекулярно-динамических (МД) расчетов ограничиваются короткими траекториями или узким температурным интервалом. В последние годы для преодоления этих ограничений активно применяются машинно-обученные межатомные потенциалы. В частности, потенциал на основе атомно-кластерного разложения (ACE), обученный на DFT-данных для системы Au–S–C–H [5], позволяет моделировать длительную динамику $Au_{25}(SR)_{18}$, включая изомеризацию, переходы к хиральным формам и коалесценцию кластеров. Альтернативные подходы используют гауссовские процессы для построения переносимых потенциалов [6].

Цель работы – исследование температурной динамики $Au_{25}(SR)_{18}$ в диапазоне 100–600 K с помощью длительных МД-расчетов с машинно-обученным межатомным потенциалом.

Объектом исследования служил кластер $Au_{25}(SR)_{18}$. Атомы золота разделяли на две группы – ядро и степлерные мотивы – по координационному числу Au–Au (радиус отсечения 3,5 Å). Расчеты проводили при температурах 100, 200, 250, 300, 400, 500 и 600 K в ансамбле NVT. Продолжительность основного расчета составляла 1 нс при шаге интегрирования 1 фс. Перед анализом из траекторий удаляли поступательное и вращательное движение кластера.

Динамические свойства анализировали с помощью среднеквадратичных смещений (MSD) атомов ядра и степлерных мотивов, функции автокорреляции скоростей (VACF), вибрационной плотности состояний (VDOS) и анализа главных компонент (PCA). Для оценки динамической неоднородности использовали нелинейный параметр α_2.

В диапазоне 100–500 K наблюдается постепенный рост MSD без резких изменений радиуса гирации и структурных параметров. Спектр VDOS сохраняет положение максимумов и форму, что указывает на устойчивость колебательных мод. Анализ PCA показывает уменьшение вклада первой главной компоненты и увеличение эффективного числа мод с ростом температуры. Параметр α_2 уменьшается, свидетельствуя об отсутствии выраженной динамической гетерогенности. Таким образом, динамика носит ангармонический, но близкий к квазигармоническому характер без признаков структурного перехода.

При 600 K происходят качественные изменения: α_2 возрастает более чем в шесть раз, увеличивается вклад первой главной компоненты PCA и время декорреляции VACF, при этом уменьшается число активных мод. Эти признаки указывают на усиление коллективных движений и динамической гетерогенности. Однако используемый потенциал обучен на данных до 500 K, поэтому результаты при 600 K носят экстраполяционный характер и требуют осторожной интерпретации [5].

В целом, атомы степлерных мотивов проявляют большую подвижность по сравнению с атомами икосаэдрического ядра. Спектральные характеристики остаются стабильными до 500 K. Полученные данные демонстрируют эффективность длительных МД-расчетов с ML-потенциалами и методов PCA/VACF для изучения температурной эволюции динамики атомарно-точных золотых кластеров. Перспективы включают применение таких подходов к кластерам иной топологии.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Jin R. Atomically precise metal nanoclusters. Chemical Reviews, 2016, vol. 116, № 18, pp. 10346-10413.
2. Heaven M. W., Dass A., White P. S., Holt K. M., Murray R. W. Crystal structure of the gold nanocluster $Au_{25}(SR)_{18}$. Journal of the American Chemical Society, 2008, vol. 130, № 12, pp. 3754-3755.
3. Walter M., Akola J., Lopez-Acevedo O., Jadzinsky P. D., Calero G., Ackerson C. J., Whetten R. L., Grönbeck H., Häkkinen H. A unified view of ligand-protected gold clusters as superatom complexes. Proceedings of the National Academy of Sciences, 2008, vol. 105, № 27, pp. 9157-9162.
4. Short M. A., Verkhovtsev A. V., Pavloudis T., Palmer R. E., Solov'yov A. V. Thermal stability of L-cysteine-protected Au_{25} clusters: interplay between melting and ligand desorption. Physical Chemistry Chemical Physics, 2025, vol. 27, pp. 22054-22063.
5. McCandler C. A., Pihlajamäki A., Malola S., Häkkinen H., Persson K. A. Gold–thiolate nanocluster dynamics and intercluster reactions enabled by a machine learned interatomic potential. ACS Nano, 2024, vol. 18, № 29, pp. 19014-19023.
6. Wang Y., Samarasinghe D. S. N. D., Deng H., Liu B., Aikens C. M. Gaussian process approach to constructing transferable force fields for thiolate-protected gold nanoclusters. Journal of Chemical Information and Modeling, 2025, vol. 65, № 8, pp. 3892-3902.

Электрофизические свойства углеродных нанотрубок при высоких давлениях

Соколовский Д.Н.[1,2], ***Волкова Я.Ю.***[1]

e-mail: dmitry.sokolovsky@urfu.ru

[1]*ФГАОУ ВО «Уральский федеральный университет им. первого Президента России Б.Н. Ельцина», Екатеринбург, Россия*

[2]*ФГАОУ ВО «Уральский государственный медицинский университет» Минздрава России, Екатеринбург, Россия*

Электрические свойства многих композитов, содержащих наноструктуры, сильно зависят от давления, что обусловлено не только строением самих наноструктур, но и контактами между соседними частицами, и образованием связей при определённых условиях. Подобные зависимости могут быть использованы при создании различных электромеханических связывающих устройств и преобразователей. В связи с высокой сложностью создания устройств на основе индивидуальных наноструктур, на сегодняшний день, значительный интерес представляет исследование свойств объектов, образованных такими структурами: жгутов, пленок, тканеподобного материала и различных композитов [1-2].

В настоящей работе представлены результаты исследования влияния высокого давления на электрофизические свойства и структуру жгутов одностенных и двустенных углеродных нанотрубок.

Для генерации высоких давлений использовались ячейки с двумя пуансонами в виде закругленного конуса и плоского основания. Пуансоны изготовлены из синтетических алмазов типа «карбонадо». Структура такого алмаза представляет собой взаимопроникающие каркасы из алмазной и металлокерамической фаз, что позволяет использовать пуансоны в качестве контактов к образцу и изучать электрические характеристики различных материалов в условиях высоких давлений.

Барические зависимости электрического сопротивления и коэффициента Зеебека жгутов одностенных и двустенных углеродных нанотрубок имеют ряд особенностей, обусловленных изменением формы поперечного сечения нанотрубок различного диаметра при давлениях до 14 ГПа. Величина давления подобных переходов обратно пропорциональна диаметру нанотрубки в третьей степени [3]. Данные преобразования являются полностью обратимыми.

Структура одностенных нанотрубок с диаметрами менее 1,5 нм сохраняется при давлениях порядка 50 ГПа. Наблюдаемые особенности барических зависимостей электрофизических свойств и спектров комбинационного рассеяния при давлениях, превышающих 22 ГПа, обусловлены разрушением структуры нанотрубок обладающих большим числом дефектов, или диаметрами более 1,5 нм. Возможно также наличие метастабильных полимеризованных состояний в диапазоне давлений 20–35 ГПа, однако использованные методики не позволяют сделать точные выводы о подобных преобразованиях.

В случае жгутов двустенных углеродных нанотрубок результаты электрических измерений и спектроскопии комбинационного рассеяния позволяют сделать вывод о том, что разрушение подобных структур со средним диаметром порядка 1,5 нм, происходит в два этапа при разных критических давлениях: сначала разрушаются внешние нанотрубки, затем внутренние.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Tonkikh A.A., Tsebro V.I., Obraztsova E.A., Rybkovskiy D.V., Orekhov A.S., Kondrashov I.I., Kauppinen E.I., Chuvilin A.L., Obraztsova E.D. Films of filled single-wall carbon nanotubes as a new material for high-performance air-sustainable transparent conductive electrodes operating in a

wide spectral range. Nanoscale, 2019, vol. 11, pp. 6755-6765.

2. Lee J., Kim J., Shin Y., and Jung I. Ultra-robust wide-range pressure sensor with fast response based on polyurethane foam doubly coated with conformal silicone rubber and CNT/TPU nanocomposites islands. Composites Part B: Engineering, 2019, vol. 177. P. 107364.

3. Elliott J.A, Sandler J.K.W., Windle A.H., Young R.J., and Shaffer M.S.P. Collapse of single-wall carbon nanotubes is diameter dependent. Physical Review Letters, 2004, vol. 92, P. 095501.

Пространственно-частотная маршрутизация спиновых волн в магнонной структуре с геометрической симметрией 2-го порядка

Солянов А.А.[1], ***Жумабекова К.Е.***[1], ***Садовников А.В.***[1]

e-mail: solyanov555@gmail.com

[1]*ФГАОУ ВО «Саратовский национальный исследовательский государственный университет имени Н.Г. Чернышевского», Саратов, Россия*

В работе представлено устройство для пространственно-частотной маршрутизации сигналов СВЧ-диапазона на основе эпитаксиальной плёнки железо-иттриевого граната (ЖИГ) толщиной 10 мкм. Актуальность исследования обусловлена потребностью в энергоэффективных альтернативах традиционным электронным компонентам обработки сигналов [1]. Предлагаемая структура реализует функцию демультиплексирования без движения заряда, что потенциально снижает диссипацию энергии и тепловыделение по сравнению с полупроводниковыми аналогами.

Исследуемая структура сформирована на подложке из галлий-гадолиниевого граната (ГГГ) и включает крестообразную систему микроволноводов шириной 300 мкм с интегрированным кольцевым резонатором в области пересечения (Рис. 1). Геометрия обеспечивает симметрию 2-го порядка, что позволяет управлять распределением энергии спиновых волн путём изменения ориентации внешнего магнитного поля без механической или электрической перестройки. Микромагнитное моделирование выполнялось в пакете MuMax3 с параметрами сетки 6×6×10 мкм³. Материальные параметры ЖИГ: намагниченность насыщения M_s = 139 кА/м, постоянная обменного взаимодействия A_{ex} = 3.614×10^{-12} Дж/м, параметр затухания Гилберта $\alpha = 2.5\times10^{-4}$.

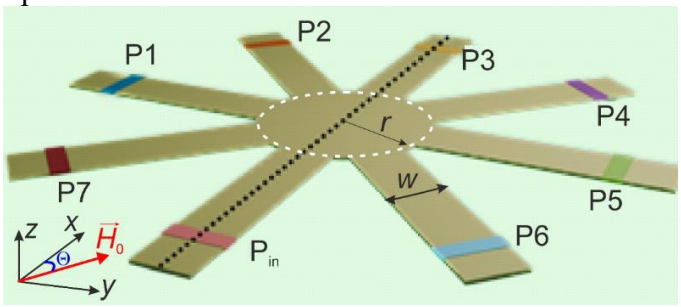


Рис. 1. Топология магнонного демультиплексора: крестообразная система волноводов с центральным кольцевым резонатором, входной порт (P_{in}) и выходные порты (P_1–P_7). Пунктирные линии — оси геометрической симметрии 2-го порядка.

Для возбуждения и детектирования спиновых волн использовались микрополосковые антенны, расположенные на концах волноводов. Входной сигнал подавался на порт P_{in}, семь выходных портов регистрировали отклик системы в частотном диапазоне 4.8–5.6 ГГц. Внешнее магнитное поле H_o = 120 мТл прикладывалось в плоскости структуры, его ориентация варьировалась в диапазоне 60°–120° относительно оси входного волновода. Такой диапазон выбран исходя из предварительного анализа, показавшего максимальную чувствительность коэффициентов передачи к углу поля вблизи оси симметрии.

На Рис. 2 представлены амплитудно-частотные характеристики выходных портов для двух характерных ориентаций поля. При θ = 90° наблюдается зеркальная симметрия АЧХ симметричных пар портов (P_1–P_5, P_2–P_4, P_6–P_7), что подтверждает сохранение геометрической симметрии системы. При отклонении поля на 20° (θ = 70°) симметрия нарушается: на частоте 5.18 ГГц сигнал в порту P_5 превышает сигнал в порту P_1 на 18 дБ, что свидетельствует о эффективном перераспределении энергии между каналами. Изоляция между «активным» и «запертым» каналами достигает 15–18 дБ в рабочем частотном диапазоне, что сопоставимо с характеристиками коммерческих СВЧ-демультиплексоров [2, 3].

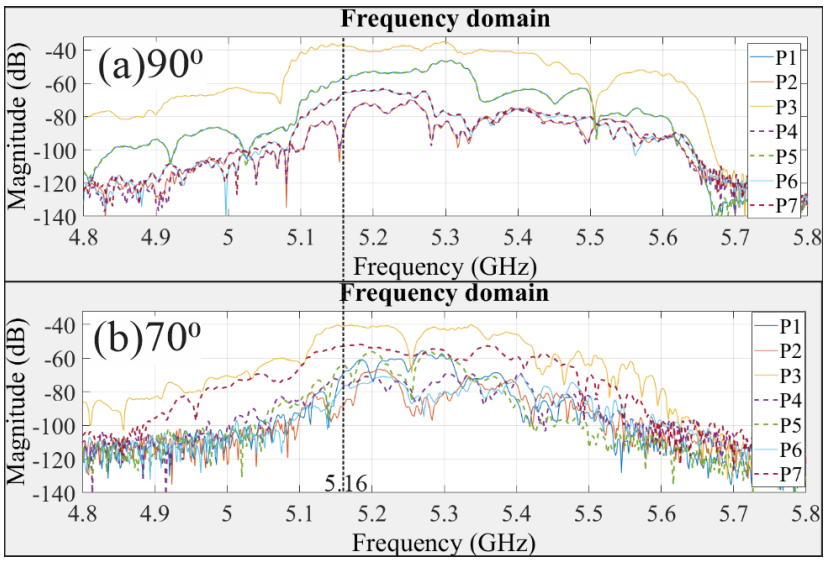


Рис. 2. Амплитудно-частотные характеристики выходных портов при ориентации магнитного поля θ = 90° (a) и θ = 70° (b). Вертикальными линиями выделена частота 5.16 ГГц, на которой достигается максимальная изоляция каналов.

Дополнительный анализ корреляционных зависимостей Пирсона между выходными сигналами выявил наличие углового порога перехода между режимами симметричного и асимметричного распределения энергии. При отклонении поля на ±(7–10)° от оси симметрии корреляция между симметричными портами стремится к нулю для «прямых» путей распространения и становится отрицательной (R ≈ –0.2...–0.4) для «обратных» путей, что интерпретируется как проявление необратимости магнонных процессов [1]. Данный порог может служить количественной характеристикой чувствительности устройства к управлению внешним полем и использоваться для оптимизации режимов переключения.

Практическая реализация устройства не требует сложной инфраструктуры: ориентация магнитного поля может изменяться с помощью поворотного механизма или системы катушек Гельмгольца, что совместимо с существующими платформами магнонной логики [4].

Полученные результаты подтверждают перспективность использования геометрической симметрии как принципа проектирования реконфигурируемых магнонных устройств. Предложенная структура может быть использована в качестве базового элемента для создания магнонных логических схем, программируемых фильтров и коммутаторов СВЧ-сигналов нового поколения.

Финансирование: работа выполнена при поддержке гранта РНФ № 23-79-30027.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Chumak A. V. et al. Magnon Spintronics. Nature Physics, 2015, vol. 11, № 6, pp. 453–461.

2. Odintsov S. A. et al. Bilayer Magnonic Crystal Directional Coupler: Interlayer Spin-Wave Coupling and Formation of Localized Beams within a Three-Dimensional Magnonic Architecture. Physical Review Applied, 2025, vol. 23, № 3, p. 034043.

3. Nikitov S. A., Filimonov Y. A. Spin Waves in Magnetic Microstructures: Magnon Logic and Information Processing. Radiophysics and Quantum Electronics, 2025, vol. 70, № 4, pp. 292–331.

4. Moshkov V. A., Martyshkin A. A., Sadovnikov A. V. Single-Channel Magnonic Demultiplexer Based on a Transversely Confined Coupled Waveguide and a Mach–Zehnder Interferometer. Radiophysics and Quantum Electronics, 2025, vol. 70, № 4, pp. 412–417.

Нанокомпозиционный аэрогель, декорированный наночастицами железа, для удаления органических красителей малахитового зеленого и метанилового желтого

Тимиргалиев А.Н., ***Зайцев Д.А., Бураков А.Е., Буракова И.В., Кузнецова Т.С.***

e-mail: timirgalievas31@mail.ru
ФГБОУ ВО «Тамбовский государственный технический университет» Тамбов, Россия

Биоугли востребованы в различных сферах, включая очистку воды и воздуха, а также хранение газов. В свете растущих экологических вызовов, производство активированного биоугля из возобновляемых источников приобретает особую актуальность [1, 2]. Углеродные материалы, получаемые из биомассы, например, сельскохозяйственных отходов, представляют собой экологичную бюджетную замену традиционным ископаемым видам топлива. Такой подход снижает потребность в невозобновляемых ресурсах и поддерживает принципы циркулярной экономики, превращая отходы в ценные продукт.

Авторами разработан материал, который состоит из оксида графена (ОГ) и мезопористого углерода в соотношении 1:1, а также дополнительно модифицирован наночастицами железа. На начальном этапе производилась ультразвуковая обработка ОГ для разрушения агломератов. После чего в суспензию добавляли мезопористый углерод и перемешивали до однородной массы. Параллельно с этим проводили растворение $FeCl_3 \cdot 6H_2O$ и $NaOOCCH_3$ в деионизированной воде, для образования водного раствора ацетата железа. Далее, полученный раствор ацетата железа смешивали со смесью ОГ и мезопористого углерода, тщательно перемешивали и нагревали до температуры кипения. Для нейтрализации образующейся в ходе реакции уксусной кислоты использовали водный раствор NaOH. Следующим этапом было, восстановление оксида графена с помощью аскорбиновой кислоты. Водный раствор аскорбиновой кислоты смешали с раствором NaOH, после чего добавляли в смесь с ОГ. Емкость с реакционной смесью доводили до кипения и выдерживали 2 часа, после чего фильтровали и промывали дистиллированной водой. Для получения аэрогеля из гидрогеля, сначала заменяли воду на органический растворитель, а затем использовали сверхкритическую сушку в органической среде – изопропанола, в качестве реагента использовали карбонат калия. Процесс проводили в течение 12 часов при температуре от 245°С до 254°С, при этом давление в реакторе составляло 65-80 атм.

В таблице 1 приведены параметры пористости разработанного материала.

Таблица 1. Параметры пористости* нанокомпозиционного аэрогеля.

№	*Наименование образца*	$S_{БЭТ}$, $м^2/г$	S_{DFT}, $м^2/г$	*d, нм*	$V_{общий}$, $см^3/г$
1	Нанокомпозиционный аэрогель	1849	1611	2,44	1,066

* $S_{БЭТ}$ – удельная поверхность по методу Брунауэра-Эммета-Теллера (БЭТ), $м^2/г$; $V_{общий}$ – общий объем пор, $см^3/г$; S_{DFT} – удельная поверхность, рассчитанная по теории функционала плотности, $м^2/г$; *d* – средний диаметр пор, нм.

Согласно табл. 1, удельная поверхность синтезированного материала составила 1849 $м^2/г$ по БЭТ. Объем пор составил 1,066 $см^3/г$ при среднем размере пор в 2,44 нм. Таким образом, был получен высокопористый композиционный материал, потенциально перспективный для применения в процессах очистки водных сред.

Для определения сорбционной способности разработанного материала по отношению к органическим загрязнителям, а именно катионный краситель малахитовый зеленый (МЗ) и анионный краситель метаниловый желтый (МЖ), проводили кинетические исследования в статических условиях. Для этого брали 0,01 г разработанного материала, объем раствора – 30

мл, равновесная концентрация – 1500 мг/л. Сорбция проводилась в течение – 2, 5, 10, 15, 30, 45, 60 мин при 100 об/мин и комнатной температуре (около 25°С) на ротаторе Multi Bio RS-24 (Biosan) и затем фильтровали. Оптическую плотность растворов синтетических красителей определяли на спектрофотометре ПЭ-5400В при длинах волн λ(МЗ)=713 нм, λ(МЖ)=530 нм. На рис. 1 приведены результаты исследований.

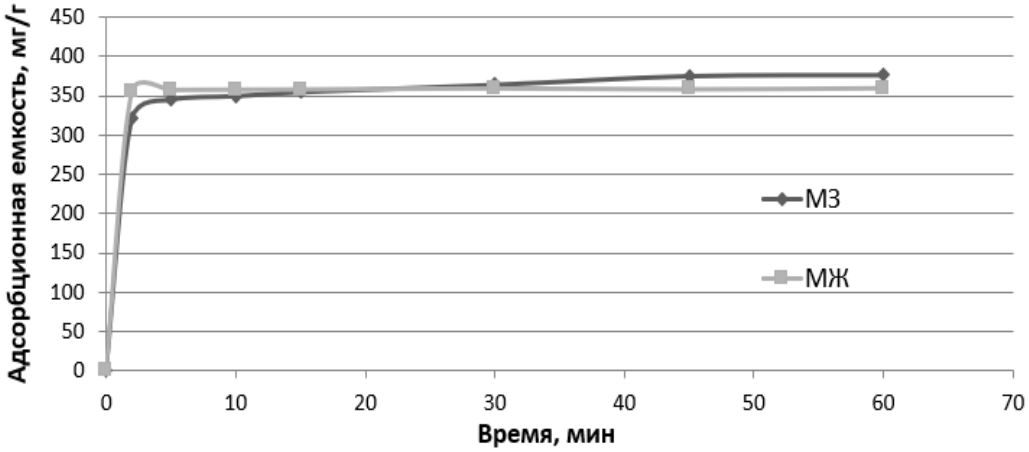


Рисунок 1. Кинетика сорбции красителей малахитового зеленого и метанилового желтого на нанокомпозиционном аэрогеле

Таким образом, сорбция красителей показала, что данный материал имеет высокую скорость извлечения анионного и катионного красителя. Следует отметить, что синтезированный материал имеет стремительный характер поглощения красителей – кинетическая кривая выходит на насыщение уже к 5 мин. Сорбционная емкость по красителям составила МЗ – 376,6 мг/г и МЖ – 359,7 мг/г.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Timirgaliev A. N., Burakova I. V., Rybakova S. O., Ananyeva O. A., Yarkin V. O., Kuznetsova T. S., Kadum A. H. K., Burakov A. E. Removal of Organic Dyes from Aqueous Solutions Using a Graphene-Containing Sorbent Based on Activated Rapeseed Biochar: Kinetics and Isotherms. Journal of Advanced Materials and Technologies, 2024, vol. 9, № 3, pp. 177–187.

2. Dilamian M., Montazer M., Yousefi H., Otzen D. E., Morshedi D. Functional Porous Protein Nanofibrils/Polysaccharides Aerogel Beads for Efficient Dyes Removal from Water. Materials Advances, 2024, vol. 5, № 18, pp. 7199–7221.

Разработка автоэмиссионных катодов на основе наноструктурированных углеродных фольг

Тхет Хму Маунг[1] , Шешин Е.П [1]

e-mail: thethmumaung90@gmail.com
[1]МФТИ«Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)», Долгопрудный, Россия

В статье рассматривается разработка и исследование автоэмиссионных катодов на основе наноструктурированных углеродных фольг, предназначенных для применения в вакуумной электронике. Актуальность работы обусловлена необходимостью создания эффективных и долговечных источников электронной эмиссии, обладающих высокой стабильностью параметров и пониженными требованиями к вакуумным условиям эксплуатации.

Автоэлектронная (полевая) эмиссия представляет собой процесс извлечения электронов с поверхности твёрдого тела под действием сильного электрического поля без существенных тепловых затрат. Данный механизм основан на квантовом туннелировании электронов через потенциальный барьер и позволяет получать устойчивые электронные токи при сравнительно низких рабочих напряжениях. По сравнению с термоэмиссионными катодами автоэмиссионные катоды характеризуются меньшим энергопотреблением, отсутствием тепловой инерции и высокой скоростью выхода на рабочий режим[1].

Наноструктурированные углеродные фольги на рис (1), сформированные на основе графитоподобных углеродных фаз, обладают высокой плотностью эмиссионных центров, химической стойкостью и устойчивостью к воздействию сильных электрических полей. Наномасштабные неоднородности поверхности обеспечивают локальное усиление электрического поля, что приводит к снижению порогового поля автоэмиссии и повышению стабильности эмиссионных характеристик.

В работе разработана технология формирования автоэмиссионных катодов с использованием промышленно доступных углеродных материалов. Для улучшения эмиссионных свойств применялся комплекс технологических процедур, включающий предварительную термическую обработку исходного материала, модификацию эмиссионной поверхности потоками ионов или фотонов с целью увеличения числа активных эмиссионных центров, а также заключительную термовакуумную тренировку. Применение многостадийной обработки позволило обеспечить воспроизводимость параметров, высокую стабильность эмиссии и увеличенный ресурс работы катодов.

Экспериментальные исследования показали, что автоэмиссионные катоды из наноструктурированных углеродных фольг демонстрируют устойчивую работу в течение длительного времени и сохраняют эмиссионные характеристики даже при неидеальных вакуумных условиях. Высокая химическая стойкость и способность эмиссионной поверхности к частичному самовосстановлению позволяют снизить требования к уровню вакуума и использовать стандартные технологии электровакуумного производства[2].

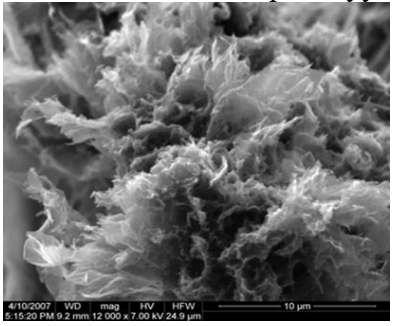


Рис. 1. Эмитирующая поверхность катода из углеродной фольги.

Полученные результаты подтверждают перспективность применения наноструктурированных углеродных фольг в качестве материала для создания эффективных и долговечных автоэмиссионных катодов для вакуумных электронных приборов.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Шешин Е. П. Структура поверхности и автоэмиссионные свойства углеродных материалов. Москва: МФТИ, 2001.

2. Лейченко А. С., Стариков П. А., Шешин Е. П. Источник свободных электронов на основе автоэмиссионного катода из углеродной фольги. Материалы XIV научно-технической конференции «Вакуумная наука и техника». Москва: МГИЭМ, 2007, с. 228–231.

Некоторые пути повышения эффективности мемристивных структур для нейроморфных вычислительных систем

Форш П.А.[1], ***Ильин А.С.*** [1], ***Мартышов М.Н.***[1], ***Форш Е.А.***[2]

e-mail: forshpa@my.msu.ru

[1]*ФГБОУ ВО Московский государственный университет имени М.В. Ломносова, Москва, Россия*

[2]*Медицинский университет Петровского ГНЦ РФ ФГБНУ «Росскийский научный центр хирургии имени академика Б.В. Петровского», Москва, Россия*

В последнее время интерес к нейроморфным вычислительным системам на основе мемристивных устройств значительно возрос. Несмотря на наличие к настоящему моменту большого многообразия мемристоров, пока еще нет устройства с безупречно подходящими параметрами для использования в нейроморфных вычислениях. Для решения указанных проблем используют различные подходы и методы. В частности, оптимизируют состав и структуру активного слоя [1-3]. В докладе представлены результаты исследований по улучшению параметров мемристоров на основе оксида гафния путем их облучения α-частицами и мемристоров на основе нестехиометрического оксида кремния за счет их термического отжига.

В случае мемристоров на основе оксида металла образование дефектов типа кислородных вакансий изменяет стехиометрию оксида, что позволяет контролировать характеристики мемристора. Одним из способов варьирования плотности кислородных вакансий является ионное облучение. Значительное улучшение характеристик мемристоров на основе диоксида титана было получено путем их облучения α-частицами. Показано, что облучение α-частицами приводит к увеличению стабильности состояний мемристора почти в три раза, отношение сопротивлений в высокоомном и низкоомном состояних при этом увеличивается более чем в два раза, а срок службы – в 1.5 раза.

Большой интерес к мемристорам на основе нестехиометрического оксида кремния связан с их совместимостью с кремниевыми технологиями. Однако просто нестехиометрический оксид кремния демонстрирует плохие параметры резистивного переключения. С целью их улучшения был проведен высокотемпературный термический отжиг (при температуре 1100 ^{o}C) в инертной атмосфере. При этом в слое оксида кремния образуются кремниевые кристаллиты нанометрового размера. Это оптимизирует процесс возникновения проводящих филаментов в пленке. В результате снижаются напряжения записи и считывания, значительно увеличивается отношение сопротивлений в непроводящем и проводящем состояниях, уменьшается разброс параметров.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Zhao Qiang et al. Effects of interaction between defects on the uniformity of doping HfO_2-based RRAM: a first principle study. J. Semicond. 2013, vol. 34, P. 032001.

2. Lin C.-Y., Lin M.-H., Wu M.-C., Lin C.-H., Tseng T.-Y. Improvement of Resistive Switching Characteristics in SrZrO3 Thin Films With Embedded Cr Layer. IEEE Electron Device Lett. 2008, vol. 29, P. 1108–1111.

3. Lin M.-H., Wu M.-C., Lin C.-H., Tseng T.-Y. Resistive switching characteristics and mechanisms of Pt-embedded SrZrO3 memory devices. J. Appl. Phys. 2010, vol. 107, P. 124117.

Сравнительный анализ углеродных и неуглеродных нанотрубок на основе квантово-химического моделирования

Ходжамаммедов М.М.[1] , Татова О.Б.[1] Тарханова Г.Г.[2]

e-mail: mekanhoja2021@gmail.com

[1]Государственный энергетический институт Туркменистана, г. Мары, Туркменистан

Углеродные и неуглеродные нанотрубки являются важнейшими представителями одномерных наноструктур, обладающих уникальными электронными, механическими и термическими свойствами. Особый интерес к данным объектам обусловлен их широкими перспективами применения в наноэлектронике, сенсорике, энергетических устройствах и композитных материалах. В последние годы значительное внимание уделяется сравнительному анализу углеродных нанотрубок (УНТ) и неуглеродных аналогов, таких как нанотрубки нитрида бора (BNNT), обладающих отличными диэлектрическими характеристиками и высокой термостабильностью [1].

Целью настоящей работы является теоретическое исследование структурных, электронных и энергетических характеристик углеродных и неуглеродных нанотрубок с использованием методов квантово-химического моделирования, а также установление взаимосвязи между геометрией, хиральностью и электронными свойствами данных наноструктур.

В качестве объектов исследования были выбраны углеродные нанотрубки типов «кресло» (armchair) и «зигзаг» (zigzag) с индексами хиральности (n,n) и (n,0), а также соответствующие им нанотрубки нитрида бора. Геометрическая оптимизация структур и расчет их электронных характеристик проводились в рамках теории функционала плотности (DFT) с использованием гибридного функционала B3LYP и базисного набора 6-31G(d). Для оценки стабильности нанотрубок рассчитывались энергии связи и полные энергии систем. Анализ электронной структуры включал определение ширины запрещенной зоны (Eg), плотности электронных состояний (DOS), а также распределения электронной плотности [2, 3].

Результаты расчетов показали, что электронные свойства углеродных нанотрубок существенно зависят от их хиральности: УНТ типа «кресло» демонстрируют металлическое поведение ($Eg \approx 0$), тогда как «зигзаг»-структуры обладают полупроводниковыми свойствами с шириной запрещенной зоны, зависящей от диаметра нанотрубки. В отличие от них, нанотрубки нитрида бора характеризуются широкой запрещенной зоной ($Eg \approx 4–6$ эВ), практически не зависящей от хиральности, что подтверждает их диэлектрическую природу.

Дополнительно установлено, что BNNT обладают более высокой термической и химической стабильностью по сравнению с УНТ, что связано с ионно-ковалентным характером связи B–N. Анализ распределения электронной плотности показал наличие поляризации связей в BNNT, в то время как для УНТ характерно равномерное распределение электронной плотности по углеродному каркасу [4].

Проведённый сравнительный анализ позволяет сделать вывод о том, что углеродные нанотрубки являются перспективными материалами для создания проводящих и полупроводниковых элементов наноэлектроники, тогда как неуглеродные нанотрубки, в частности BNNT, целесообразно использовать в качестве диэлектрических, термостойких и радиационно-устойчивых компонентов. Полученные результаты могут быть использованы при проектировании гибридных наноструктур с заданными функциональными свойствами.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Iijima S. Helical Microtubules of Graphitic Carbon. Nature, 1991, vol. 354, pp. 56–58.
2. Rubio A., Corkill J., Cohen M. Theory of Graphitic Boron Nitride Nanotubes. Physical Review B, 1994, vol. 49, № 7, pp. 5081–5084.
3. Golberg D. et al. Boron Nitride Nanotubes and Nanosheets. ACS Nano, 2010, vol. 4, № 6, pp. 2979–2993.
4. Saito R., Dresselhaus G., Dresselhaus M. Physical Properties of Carbon Nanotubes. London: Imperial College Press, 1998, 256 pp.

Квантово-химическое исследование графена и его производных для применения в наноэлектронике

Аманова О.Г.[1], Шохрадов Б.[1] Сухрабов С.С.[2]

e-mail: mekanhoja2021@gmail.com
[1]Государственный энергетический институт Туркменистана, г. Мары, Туркменистан

Графен представляет собой двумерный аллотроп углерода с гексагональной кристаллической решеткой, обладающий уникальными электронными, механическими и тепловыми свойствами. Благодаря высокой подвижности носителей заряда, большой удельной поверхности и высокой прочности, графен и его производные рассматриваются как ключевые материалы для развития наноэлектроники, сенсорных систем и энергетических устройств. В последние годы особое внимание уделяется модификации графена с целью управления его электронными характеристиками [1].

Целью данной работы является теоретическое исследование влияния химической модификации на электронную структуру графена и его производных, таких как оксид графена (GO) и восстановленный оксид графена (rGO), с использованием методов квантово-химического моделирования.

В качестве объектов исследования рассмотрены модели идеального графена, графена с функциональными группами (–OH, –COOH), а также структуры оксида графена. Расчёты проводились в рамках теории функционала плотности (DFT) с применением гибридного функционала B3LYP и базисного набора 6-31G(d). Геометрическая оптимизация структур сопровождалась расчетом полной энергии, плотности электронных состояний (DOS) и ширины запрещенной зоны (Eg) [4].

Результаты моделирования показали, что идеальный графен обладает нулевой шириной запрещенной зоны ($Eg \approx 0$), что обуславливает его полуметаллический характер. Однако введение функциональных групп приводит к нарушению симметрии кристаллической решетки и открытию запрещенной зоны. В частности, для оксида графена наблюдается значительное увеличение Eg до значений порядка 2–3 эВ, что делает его перспективным материалом для полупроводниковых приложений [2, 3],

Анализ распределения электронной плотности показал, что функционализация графена приводит к локализации зарядов в области функциональных групп, что существенно влияет на проводимость материала. Восстановленный оксид графена (rGO) демонстрирует частичное восстановление проводящих свойств за счет удаления кислородсодержащих групп, однако сохраняет дефекты структуры, влияющие на транспортные характеристики.

Таким образом, результаты исследования подтверждают, что контролируемая химическая модификация графена является эффективным инструментом управления его электронными свойствами. Это открывает широкие перспективы для создания на его основе наноустройств с заданными характеристиками, включая транзисторы, сенсоры и элементы накопления энергии.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Novoselov K. S. et al. Electric field effect in atomically thin carbon films. Science, 2004, vol. 306, № 5696, pp. 666–669.

2. Geim A. K., Novoselov K. S. The rise of graphene. Nature Materials, 2007, vol. 6, № 3, pp. 183–191.

3. Dreyer D. R. et al. The chemistry of graphene oxide. Chemical Society Reviews, 2010, vol. 39, № 1, pp. 228–240.

4. Pei S., Cheng H. M. The reduction of graphene oxide. Carbon, 2012, vol. 50, № 9, pp. 3210–3228.

Применение углеродных и неуглеродных наноструктур в современных технологиях: сравнительный анализ свойств и функциональных возможностей

Ходжамаммедов М.М.[1] Рашидов М.М.[1] Реджепов К.М.[2]

e-mail: mekanhoja2021@gmail.com

[1]Государственный энергетический институт Туркменистана, г. Мары, Туркменистан

Углеродные и неуглеродные наноструктуры занимают ключевое место в развитии современных нанотехнологий благодаря их уникальным физико-химическим свойствам и широкому спектру практических применений. К углеродным наноструктурам относятся графен, углеродные нанотрубки и фуллерены, тогда как неуглеродные аналоги включают нанотрубки нитрида бора (BNNT), оксидные и другие неорганические наноструктуры. Различия в электронной структуре и типе химической связи определяют особенности их применения в различных областях науки и техники [1].

Целью данной работы является анализ и систематизация областей применения углеродных и неуглеродных наноструктур на основе их структурных, электронных и термических характеристик.

В работе проведен сравнительный анализ свойств различных наноструктур с использованием данных квантово-химического моделирования и литературных источников. Показано, что углеродные наноструктуры обладают высокой электропроводностью, механической прочностью и гибкостью, что делает их перспективными для применения в наноэлектронике, гибких электронных устройствах, сенсорах и суперконденсаторах. В частности, графен и углеродные нанотрубки широко используются в качестве активных элементов транзисторов, электродных материалов и чувствительных элементов газовых сенсоров.

В отличие от углеродных материалов, неуглеродные наноструктуры, такие как нанотрубки нитрида бора, характеризуются широкой запрещенной зоной ($E_g \approx 4–6$ эВ), высокой термической стабильностью и химической инертностью. Эти свойства делают их эффективными диэлектриками и теплоустойчивыми материалами, применяемыми в условиях высоких температур, радиационного воздействия и агрессивных сред. Кроме того, оксидные наноструктуры находят применение в фотокатализе, энергетике и биомедицинских технологиях [2, 3].

Особый интерес представляет создание гибридных наноматериалов, сочетающих углеродные и неуглеродные компоненты. Такие структуры позволяют объединить высокую проводимость углеродных материалов с диэлектрическими и защитными свойствами неуглеродных соединений, что открывает новые возможности для разработки функциональных наноустройств [4].

Таким образом, выбор типа наноструктуры определяется требованиями конкретного применения: углеродные наноматериалы эффективны в проводящих и активных элементах устройств, тогда как неуглеродные наноструктуры предпочтительны для изоляционных, защитных и термостойких компонентов. Полученные результаты могут быть использованы при проектировании новых материалов для электроники, энергетики и сенсорных систем.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Novoselov K. S. et al. Electric field effect in atomically thin carbon films. Science, 2004, vol. 306, № 5696, pp. 666–669.

2. ijima S. Helical microtubules of graphitic carbon. Nature, 1991, vol. 354, № 6348, pp. 56–58.

3. Golberg D. et al. Boron nitride nanotubes: Properties, synthesis and applications. ACS Nano, 2010, vol. 4, № 6, pp. 2979–2993.

4. Geim A. K. Graphene: Status and prospects. Science, 2009, vol. 324, № 5934, pp. 1530–1534.

Применение нанотехнологий в биотехнологии: наноматериалы для диагностики и медицины

Аманова О.Г.[1], Рашидова Н.Р.[1] Рахманов Ы.А.[2]

e-mail: mekanhoja2021@gmail.com

[1]Государственный энергетический институт Туркменистана, г. Мары, Туркменистан

Современное развитие науки и технологий характеризуется активной интеграцией нанотехнологий и биотехнологии, что привело к формированию нового междисциплинарного направления — нанобиотехнологии. Использование наноматериалов открывает широкие возможности для создания высокочувствительных диагностических систем, эффективных методов доставки лекарственных препаратов и новых биосовместимых материалов [1].

Целью настоящей работы является анализ применения наноматериалов в биотехнологии и медицине, а также исследование их взаимодействия с биологическими системами на наноуровне.

В работе рассмотрены различные типы наноматериалов, включая углеродные нанотрубки, графен и его производные, а также металлические наночастицы (золото, серебро). Анализ проведён с использованием данных теоретических исследований и современных экспериментальных результатов. Особое внимание уделено физико-химическим свойствам наноматериалов, таким как высокая удельная поверхность, возможность функционализации и способность к селективному взаимодействию с биомолекулами.

Показано, что углеродные наноструктуры эффективно применяются в качестве носителей лекарственных средств благодаря их способности проникать через клеточные мембраны и связываться с биологически активными молекулами. Графен и его производные используются для создания биосенсоров с высокой чувствительностью, позволяющих обнаруживать биомаркеры заболеваний на ранних стадиях [2, 3] Металлические наночастицы, в частности золото, широко применяются в диагностике и терапии, включая фототермическое лечение онкологических заболеваний.

Важным аспектом является биосовместимость и токсичность наноматериалов. Установлено, что функционализация поверхности наночастиц позволяет снизить их цитотоксичность и повысить селективность действия. Кроме того, размер, форма и химический состав наноматериалов играют ключевую роль в их взаимодействии с клетками и тканями [4].

Таким образом, нанобиотехнологии открывают новые перспективы для развития медицины, включая раннюю диагностику, таргетную терапию и регенеративную медицину. Полученные результаты подчеркивают необходимость дальнейших исследований в области безопасности и эффективности применения наноматериалов в биологических системах.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Freitas R. A. Prospects of nanomedicine: From molecular manufacturing to clinical applications. Nanomedicine, 1999, vol. 1, № 1, pp. 1–25.

2. Ferrari M. Cancer nanotechnology: Opportunities and challenges. Nature Reviews Cancer, 2005, vol. 5, № 3, pp. 161–171.

3. Novoselov K. S. et al. Graphene in biology: Emerging applications and potential risks. Nature, 2012, vol. 488, № 7413, pp. 586–592.

4. Dykman L., Khlebtsov N. Gold nanoparticles in biomedical applications: Recent advances and perspectives. Chemical Society Reviews, 2012, vol. 41, № 5, pp. 2256–2282

Электрохимический синтез поверхностно модифицированной оксидами переходных металлов углеродной бумаги как электродного материала для суперконденсаторов

Храменкова А.В.[1], ***Мощенко В.В.***[1]

e-mail: anna.vl7@yandex.ru
[1]*ФГБОУ ВО «Южно-Российский государственный политехнический университет (НПИ)», Новочеркасск, Россия*

Суперконденсаторы играют одну из ключевых ролей в развитии электрохимических систем накопления энергии благодаря их высокой удельной мощности, быстрым процессам заряда – разряда и длительному сроку службы при циклировании [1,2]. При этом, несмотря на все существующее многообразие технологических решений при разработке суперконденсаторов, одной из основных проблем, требующих новых подходов, является повышение их плотности энергии без снижения плотности мощности и длительности срока службы [3].

Наиболее изученными материалами для создания электродов для суперконденсаторов следует считать материалы на основе различных форм углерода, полимеры, а также оксиды переходных металлов. Особенно следует отметить перспективность создания электродных материалов без связующего, где проводящая подложка одновременно выполняет функцию и токосъемника. Электродные материалы без использования связующего привлекают все большее внимание для использования в суперконденсаторах с щелочным электролитом благодаря своим уникальным механическим, электрохимическим свойствам, а также экологичности [4].

Целью данной работы был синтез электродных материалов для суперконденсаторов с щелочным электролитом на основе углеродной бумаги, модифицированной оксидами переходных металлов, с использованием нестационарного электролиза и исследование их физико-химических и электрохимических свойств.

Морфология поверхности исходной углеродной бумаги и полученных электродных материалов была исследована с помощью сканирующей электронной микроскопии.

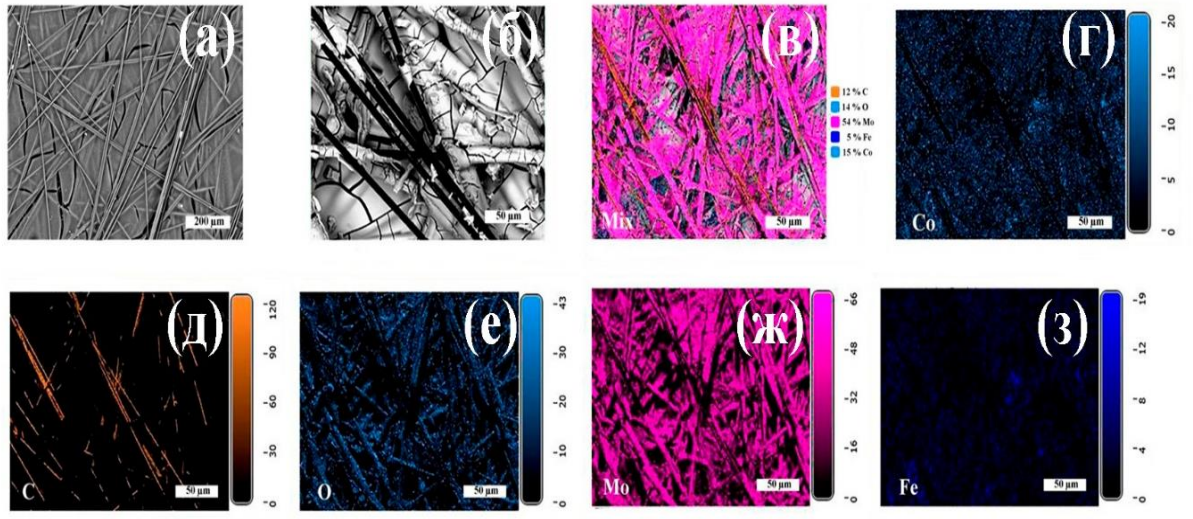


Рис. 1. СЭМ изображения чистой углеродной бумаги (а) и электродного материала (б), а также соответствующие карты распределения элементов по поверхности (в-з)

Как видно из рисунка 1 а, исходная углеродная бумага имеет достаточно гладкую поверхность с хаотично расположенными на ней волокнами диаметром до 8 мкм. В результате

электролиза на поверхности углеродной бумаги отчетливо наблюдается слой оксидов переходных металлов, характеризующийся сетчатой структурой (Рис. 1 б). Из карт распределения элементов по поверхности (Рис. 1 в-з) видно, что все элементы достаточно равномерно распределены по поверхности. Электрохимические характеристики синтезированных материалов в 2М KOH представлены на рисунке 2.

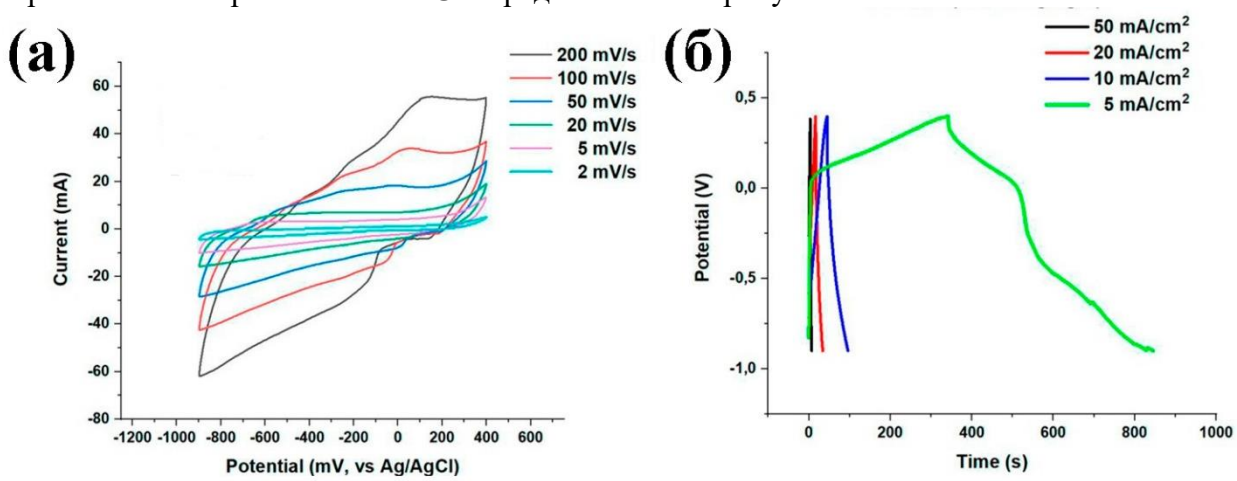


Рис. 2. Электрохимические исследования полученных электродных материалов: (а) – ЦВА, (б) – гальваностатический заряд-разряд

Удельная емкость полученных электродных материалов, рассчитанная по кривым гальваностатического заряда-разряда, составила 1692 мФ/см^2 при плотности тока 5 мА/см^2.

Таким образом, в данной работе были полученные электродные материалы на основе углеродной бумаги, модифицированной оксидами переходных металлов, с использованием нестационарного электролиза. Показана перспективность их использования в качестве электродов для суперконденсаторов с щелочным электролитом.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Şahin M. E., Blaabjerg F., Sangwongwanich A. A Comprehensive Review on Supercapacitor Applications and Developments. Energies, 2022, vol. 15, № 3, p. 674.

2. Yang W., Peng D., Kimura H., Zhang X., Sun X., Pashameah R. A., Alzahrani E., Wang B., Guo Z., Du W., Hou C. Honeycomb-like nitrogen-doped porous carbon decorated with Co_3O_4 nanoparticles for superior electrochemical performance pseudo-capacitive lithium storage and supercapacitors. Advanced Composites and Hybrid Materials, 2022, vol. 5, pp. 3146–3157.

3. Duy L. T., Sial Q. A., Seo H. Improvement of Stretchable and Washable Carbon-Nanotube-Based Textile Supercapacitors by Using Molybdenum Trioxide Nanoflakes and Prewashing Treatment. Advanced Materials Technologies, 2021, vol. 7, p. 2101204.

4. Yue W., Yu Z. Preparation of Micropores-Rich Carbon Materials for High Energy Density Aqueous Supercapacitors Using Bio-Templates and Green N-Doping Strategy. Applied Surface Science, 2025, vol. 685, p. 162100.

Получение функционализированного графита из стержней отработанных Zn-C батарей

Чердакли Ю.П.,[1] Бугорская Д.И.,[1] Карташинская Е.С.,[1,2] Глазунова В.А.,[1,3] Волкова Г.К.,[1,3] Бурховецкий В.В.,[1,3] Горбатко С.В.[2]

e-mail: yuliatcherdakli@yandex.ru

[1]ФГБНУ «Институт физико-органической химии и углехимии им. Л.М. Литвиненко», Донецк, ДНР, Россия

[2] ФГБОУ ВО «Донецкий национальный технический университет», Донецк, ДНР, Россия

[3]ФГБНУ «Донецкий физико-технический институт им. А.А. Галкина», Донецк ДНР, Россия

Рост интереса к получению функциональных углеродных материалов стимулирует поиск доступных источников углеродного сырья и методов его химической модификации. Одним из потенциальных источников такого сырья являются графитовые стержни отработанных Zn–C батарей, которые в большинстве технологий по переработки остаются практически неиспользованными. Окислительная функционализация графита приводит к образованию оксида графита, характеризующегося увеличенным межслоевым расстоянием, наличием кислородсодержащих функциональных групп и развитой структурой. Эти особенности обеспечивают высокую реакционную способность материала и создают благоприятные условия для его дальнейшей химической модификации и применения в различных областях материаловедения. В связи с этим исследование способов и механизмов процесса окисления графита, извлеченного из отработанных Zn–C батарей, является актуальным и перспективным направлением [1, 2].

В настоящей работе графитовые стержни, извлеченные из отработанных Zn–C батарей, подвергали предварительной механической и химической очистке. Окислительная модификация осуществлялась в контролируемых условиях с варьированием концентрации окислителя, температуры и продолжительности процесса [3, 4].

Окисление проводили в системе H_2SO_4/H_3PO_4–$KMnO_4$ при пониженной температуре с последующей выдержкой при 35–45 °C в 2 этапа: по 2 часа в течение 2 последующих дней. Реакцию останавливали добавлением воды и H_2O_2. Полученный продукт промывали до нейтрального pH, подвергали ультразвуковой обработке в течение 1 часа и оставляли отстаиваться. На следующий день переносили верхнюю фракцию на чашку Петри и сушили при 25 °C. Полученный материал был исследован методами рентгеноструктурного анализа, а также просвечивающей и сканирующей микроскопии с возможностью оценки элементного состава образца.

На СЭМ-микрофотографиях (рис. 1 а, б) видно сохранение слоистой морфологии материала с выраженной деламинацией и формированием рыхлой пластинчатой структуры, характерной для окисленного графита. Результаты ПЭМ-исследований (рис. 1 в, г) выявили тонкие складчатые листы с локальными областями разупорядочения. Микроэлектронограмма представлена диффузными кольцами, что свидетельствует о снижении степени кристалличности по сравнению с исходным графитом. Вместе с тем, наличие гексагональной симметрии рефлексов свидетельствует о присутствии малослойных графеноподобных включений.

Рентгенофазовый анализ (рис. 1 д) выявил интенсивный пик в области $2\Theta \sim 11°$, соответствующий рефлексу *001* для оксида графита. Следует отметить несколько меньший по интенсивности рефлекс *002* в области $2\Theta \sim 23\text{-}26°$, который можно отнести к присутствию неокисленного углеродного материала. Смещение основного пика из области 26° в низкоугловую область указывает на внедрение кислородсодержащих групп и молекул воды в межслоевое пространство. Размер кристаллитов составил $L_c \approx 4$ нм, что соответствует примерно 5-7 слоям оксида графена в пакете [4-6].

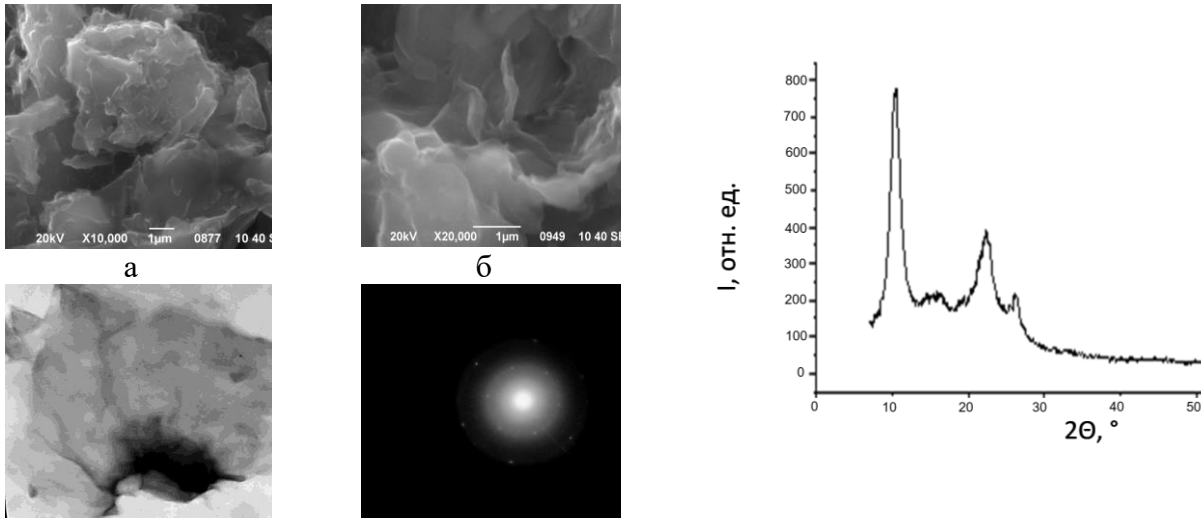


Рис. 1. СЭМ-изображение морфологии исходного обеззоленного (а) и окисленного графита (б), а также ПЭМ-изображение (в), микродифрактограмма (г) и рентгенограмма (д) окисленного графита из стержней Zn–C батарей.

Морфологические исследования подтвердили сохранение слоистой структуры синтезированного материала при одновременной деламинации и некотором снижении степени кристалличности, что определяет перспективность материала для дальнейшей функционализации и применения.

Полученные результаты демонстрируют возможность эффективного использования углеродного компонента отработанных Zn–C батарей в качестве вторичного сырья для получения функционализированных углеродных материалов, что расширяет направления переработки отходов химических источников тока и открывает перспективы создания новых углеродных материалов.

Финансирование: Работа выполнена в рамках бюджетной темы FRES-2026-0015 Министерства науки и высшего образования Российской Федерации.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Vuong, T. T. T., Nguyen, P. L., Nguyen, N. T., Phung, T. V. B., Le, P.-A. Zinc-Carbon Battery Recycling for Investigating Carbon Materials for Supercapacitor Applications. *ACS Omega*, 2024, vol. 9, 21, pp. 22543–22556.

2. Ferella F., Ida De Michelis, Vegli F. Process for the recycling of alkaline and zinc–carbon spent batteries. Journal of Power Sources, vol. 183, 2008, pp. 805–811.

3. Hummers, W.S., Offeman, R.E. Preparation of graphitic oxide. Journal of the American Chemical Society, 1958, vol. 80, pp. 1339.

4. Marcano D. C., Kosynkin D. V., Berlin J. M., Sinitskii A., Sun Z., Slesarev A., Alemany L. B., Lu W. и Tour J. M. Improved synthesis of graphene oxide. ACS Nano, 2010, vol. 4, pp. 4806–4814.

5. Dimiev A.M., Tour, J.M. Mechanism of graphene oxide formation. ACS Nano, 2014, vol. 8, pp. 3060–3068.

6. Dreyer D. R., Park S., Bielawski C. W., Ruoff R. S. The chemistry of graphene oxide, Chemical Society Reviews,2010, vol. 39, pp. 228–240.

Молекулярно-динамическое исследование процесса коалесценции металлических наночастиц

***Череповская А.А.*[1,2], *Рыжкова Д.А.*[1], *Гафнер Ю.Я.*[1]**

e-mail: arina.cherepovskaya@mail.ru

[1]*ФГБОУ ВО «Хакасский государственный университет им. Н.Ф. Катанова», Абакан, Россия*

[2]*ФГБОУ ВО «Алтайский государственный технический университет им. И.И. Ползунова», Барнаул, Россия*

Металлические наночастицы (НЧ) широко применяются в разных областях промышленности, например, в катализе, сенсорике, определении химического состава газов (SERS подложки) и электронике. Изучение механизмов формирования наночастиц металла и особенностей применения в технологических процессах может помочь более эффективно управлять их размерами и формой, что, в свою очередь, позволяет тонко настраивать физико-химические свойства НЧ. В настоящее время существуют различные методы, позволяющие синтезировать металлические наночастицы с требуемыми размерами и формой. Однако применение таких НЧ в технологических процессах сопряжено с рядом рисков, одним из которых является коалесценция. Например, объединение между собой наночастиц, находящихся на SERS подложке, сильно влияет на её чувствительность. Следовательно, в наноэлектронике должны использоваться объекты со строго фиксированным размером и формой, а коалесценция часто оказывает негативное влияние. Поэтому целью работы стало определение максимально возможного расстояния между НЧ различных металлов до наступления начала коалесценции.

Для анализа процесса коалесценции нами был выбран метод молекулярной динамики (МД), который позволяет на атомном уровне подробно изучить возможные механизмы такого объединения. Для имитации коалесценции металлических наночастиц и анализа термического воздействия на них была использована компьютерная программа MDNTP, разработанная Dr. Ralf Meyer, University Duisburg Germany. Силы межатомного взаимодействия вычислялись с использованием модифицированного потенциала сильной связи TB-SMA на основе параметров, рассчитанных в [1]. Температура определялась через среднюю кинетическую энергию атомов при помощи скоростного алгоритма Верле с шагом по времени h = 1 фс. Структурные переходы были идентифицированы с помощью визуализаторов xmakemol и OVITO.

В качестве исходных объектов использовались наборы Au, Ag, Ni, Cu, Pt и Pb наночастиц различного диаметра и находящиеся на разных расстояниях R друг от друга (R = 0.3 – 1.5 nm), а взаимная ориентация их атомных плоскостей задавалась случайно выбранным вращением до достижения необходимого результата [2]. Параметры моделирования были подобраны так, что бы максимально точно имитировать результаты электронно-микроскопических исследований [3].

На первом этапе для анализа зависимости критического расстояния коалесценции НЧ типового размера (D = 3 nm и 6 nm) от различных параметров была выбрана температура T = 600 K. Отметим, что выбранная температура очень сильно различалась в процентном соотношении к соответствующим температурам плавления T_m металлов в объемном состоянии.

Вначале изучалась зависимость критического радиуса коалесценции НЧ от температуры плавления металлов в объемном состоянии T_m (рис. 1а). Из полученных результатов можно сделать вывод о том, что чем больше T_m, тем меньше критический радиус коалесценции. Данные для Au НЧ несколько выбиваются из этого ряда, и причину данного факта еще придется определить.

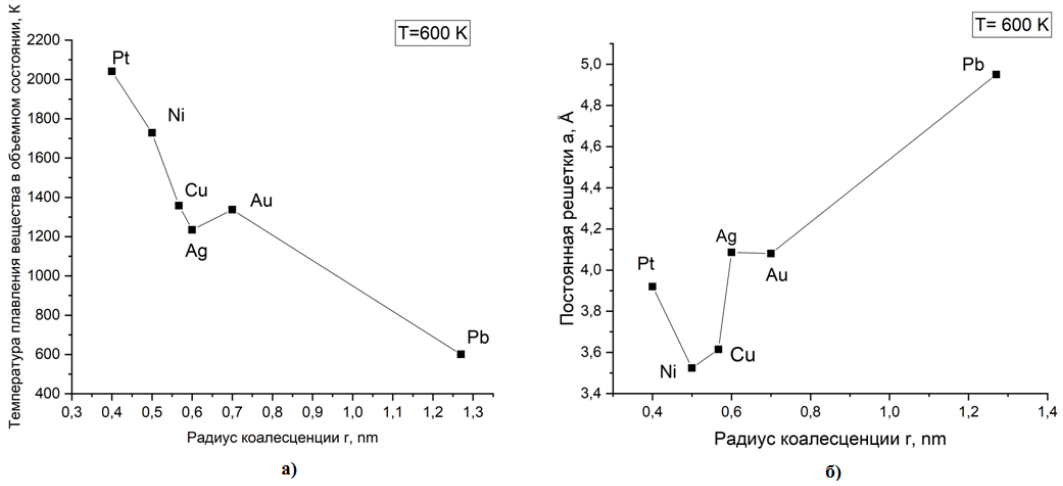


Рис. 1. График зависимости критического радиуса коалесценции металлических НЧ от температуры плавления вещества в объемном состоянии (а); от постоянной кристаллической решетки (б)

Для определения влияния гравитационных эффектов (возникающих при перемещении металлических НЧ по поверхности подложки) была изучена зависимость критического радиуса коалесценции от массы кластера. Было обнаружено, что явно выраженной тенденции нет. Для НЧ с наибольшей и близкой по величине молярной массой (Pt, Au и Pb) имеется линейная зависимость увеличения критического радиуса с уменьшением массы НЧ. Для остальных НЧ тенденция прямо противоположная.

На следующем этапе изучалась зависимость критического радиуса коалесценции от параметра ячейки кристаллической решётки (рис. 1б). Наблюдается тенденция, схожая с представленной на рис. 1а – определяющую роль в коалесценции близкорасположенных НЧ одного металла играет величина их межатомного взаимодействия, что, в конечном итоге, выражается и в температуре плавления, и в параметре решётки. Однако Pt НЧ выпадают из общей тенденции. Причиной, на наш взгляд, являлась заданная температура моделирования (T=600 K). Так, Pb НЧ при T=600 K уже находятся в расплавленном состоянии, а Pt НЧ ещё далеки от температуры Таммана. Это может существенно влиять на рассчитанный критический радиус коалесценции.

Для того, что бы НЧ всех металлов были примерно в одинаковых условиях моделирования нами будет произведен расчет критического радиуса коалесценции в едином для всех температурном интервале 0.5-0.55 T_m. В этом случае НЧ всех металлов находятся чуть выше предела Таммана, что обозначает примерно одинаковые термические условия для поверхностной диффузии атомов, но их реальная динамика будет теперь определяться только величиной межатомного взаимодействия для конкретного металла.

Финансирование: работа выполнена за счет гранта РНФ (проект № 25-22-20029, https://rscf.ru/project/25-22-20029/) при паритетной финансовой поддержке Правительства Республики Хакасия.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Rapallo A., Rossi G., Ferrando R. et al. Global optimization of bimetallic cluster structures. I. Size-mismatched Ag-Cu, Ag-Ni, and Au-Cu systems. The Journal of Chemical Physics, 2005, vol. 122, № 19, pp. 194308-1-194308-13.

2. Antúnez-García J., Mejía-Rosales S., Pérez-Tijerina E. et al. Coalescence and Collisions of Gold Nanoparticles. Materials, 2011, vol. 4, № 2, pp. 368-379.

3. Gafner Yu. Ya., Gromov D. G., Volkov R. L. et al. Mechanisms of Au and Ag nanoparticle array evolution studied by in-situ TEM and molecular dynamics simulation. Surfaces and Interfaces, 2024, vol. 54. Art no. 105165.

Получение устойчивых водных дисперсий фуллерена С60 методом замены растворителя и изучение их свойств

Шакирова Л.Ф.[1], Гатауллин А.Р.[1], Богданова С.А.[1]

e-mail: lenarashakirovaaaa@yandex.ru
ФГБОУ ВО «Казанский национальный исследовательский технологический университет», Казань, Россия

Углеродные наночастицы благодаря своим уникальным свойствам имеют большие перспективы применения в различных областях науки и техники, включая медицину, фармацевтику, косметологию и полимерную химию [1]. Для них характерны высокая удельная поверхность, значительная сорбционная способность, выраженные антиоксидантные свойства, а также специфические электронные и фотохимические характеристики. Эти особенности делают углеродные наноструктуры привлекательными для создания систем доставки лекарственных препаратов, разработки диагностических методов, получения функциональных покрытий и новых композиционных материалов.

Среди различных типов углеродных наноструктур особое внимание привлекает фуллерен C_{60}, что обусловлено его высокой химической устойчивостью и способностью участвовать в окислительно-восстановительных процессах. Вместе с тем широкое практическое применение фуллеренов ограничено их крайне низкой растворимостью в воде и выраженной склонностью к агрегации. В этой связи разработка способов получения устойчивых водных дисперсий фуллерена и изучение факторов, определяющих их стабильность и физико-химические характеристики, представляет значительный научный и практический интерес. Одним из эффективных подходов является метод замены растворителя, позволяющий переводить гидрофобные наночастицы в водную фазу и формировать устойчивые коллоидные системы [2]. Поэтому целью данной работы являлось получение устойчивых водных дисперсий фуллерена методом замены растворителя и исследование их коллоидно-химических свойств.

В качестве объекта исследования использовали фуллерен C_{60} производства ООО «НеоТекПродакт» (г. Санкт-Петербург). Дисперсии фуллерена готовили методом замены растворителя: раствор C_{60} в толуоле с концентрацией 1 мг/мл при интенсивном перемешивании на магнитной мешалке постепенно, по каплям, вводили в смесь ацетона и водного раствора поверхностно-активного вещества, после чего органические растворители удаляли. Отсутствие остаточного растворителя контролировали рефрактометрическим методом. В качестве стабилизаторов применяли оксиэтилированные алкилфенолы со средней степенью оксиэтилирования n = 8 и n = 10, оксиэтилированный высший жирный спирт со степенью оксиэтилирования n = 10, а также додецилсульфат натрия. Интенсивность диспергирования и устойчивость образующихся коллоидных систем оценивали методом абсорбционной спектроскопии с использованием двулучевого спектрофотометра ПЭ-5400УФ. Размер частиц фуллерена рассчитан по методу спектра мутности [2]. Ультразвуковую обработку водных дисперсий фуллерена проводили на диспергаторе МЭФ-93 при частоте 20 кГц в течение 40 минут. На основе полученных дисперсий были приготовлены гелевые системы с использованием карбомера 141G [3]. Реологические свойства гелей изучали с помощью ротационного вискозиметра Brookfield DV-II+ Pro, а их электропроводность определяли кондуктометрическим методом на кондуктометре Марк-603.

В ходе исследования установлено, что эффективность перехода фуллерена в водную фазу в значительной степени определяется составом исходной смеси растворителей. Наиболее устойчивые дисперсные системы образуются при соотношении ацетон:вода 3:1. При указанном составе смеси наблюдалась наибольшая оптическая плотность дисперсий, а также минимальное снижение её значения при хранении в течение 30 суток. Установлено, что оптимальная концентрация исходного раствора фуллерена составляет 1 мг/мл. Увеличение

концентрации приводит к усилению процессов агрегации частиц, что, в свою очередь, снижает устойчивость получаемых дисперсий. Использование поверхностно-активных веществ заметно повышает стабильность систем за счёт образования адсорбционных слоёв на поверхности углеродных наночастиц [4, 5]. Наиболее эффективным стабилизатором оказался оксиэтилированный высший жирный спирт при концентрации $6 \cdot 10^{-4}$ моль/л, обеспечивающий формирование дисперсий с минимальным средним размером частиц и высокой устойчивостью при хранении. Показано также, что ультразвуковая обработка способствует дезагрегации частиц и приводит к увеличению оптической плотности дисперсий в системах, содержащих ПАВ.

Полученные водные дисперсии были использованы для приготовления гелевых систем. Установлено, что размер частиц фуллерена оказывает заметное влияние на реологические и электропроводящие характеристики гелей. Выявлено, что максимальное значение электропроводности наблюдается при среднем размере частиц 230 нм.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Богданова С.А., Гатауллин А.Р., Рахматуллина А.П., Галяметдинов Ю.Г. Свойства эластомерных композиций, полученных на основе бутадиен-стирольного латекса с добавками дисперсий углеродных нанотрубок. Промышленное производство и использование эластомеров, 2016, №. 2, С. 19-26.

2. Целуйкин В.Н., Гунькин И.Ф., Панкстьянов А.Ю. Получение водных дисперсий фуллерена. Журнал физической химии, 2018 №. 11, С. 1814-1816.

3. Аллаярова У.Ю., Климанова Е.Н., Сашенкова Т.Е., Абрамов В.А., Гатауллин А.Р., Богданова С.А., Демидов С.В., Мищенко Д.В., Аллаяров С.Р. Влияние гамма-облучения на токсичность редкосшитой полиакриловой кислоты и геля на его основе. Химия высоких энергий. 2024, Т. 58, №. 2, С. 100-106.

4. Гатауллин А.Р., Богданова С.А., Фасхутдинова А.И., Галяметдинов Ю.Г. Влияние адсорбционного взаимодействия неионогенных поверхностно-активных веществ с углеродными нанотрубками на коллоидно-химические свойства дисперсий. Вестник Технологического университета, 2018, Т. 21, №. 5, С. 9-13.

5. Гатауллин А.Р., Богданова С.А., Алексеева М.С., Галяметдинов Ю.Г. Влияние адсрбционного взаимодействия поверхностно-активных веществ с фуллереном C_{60} на его ультразвуковое диспергирование в мицеллярных средах. Вестник Технологического университета, 2018, Т. 21, №. 12, С. 19-23.

Разработка и исследование характеристик автокатодов для электронных пушек

Чит Фон Паинг[1], Шешин Е.П.[1]

e-mail: chitphonepaing6@gmail.com

Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет) (МФТИ, Физтех),Москва,Россия

Разработка электронных пушек на основе полевых эмиссионных катодов представляет значительный интерес для современных вакуумных электронных устройств благодаря их способности формировать электронные пучки с высокой яркостью, малым энергетическим разбросом и быстрым временем отклика [1, 2]. Электронные пушки с полевой эмиссией обладают преимуществами по сравнению с термоэмиссионными источниками, включая сниженное энергопотребление, улучшенную когерентность пучка и стабильную работу при более низких температурах [2, 3]. В настоящей работе представлены разработка, изготовление и экспериментальное исследование электронных пушек с полевыми эмиссионными катодами.

Исследование сосредоточено на конфигурациях катодов с одним остриём и с множеством остриёв. Анализируется влияние геометрии катода, площади эмиссии и усиления электрического поля на характеристики эмиссии [1, 2, 4]. Характеристики «ток–напряжение» измеряются и интерпретируются в рамках формализма Фаулера–Нордгейма, что позволяет оценить коэффициенты усиления поля и стабильность эмиссии [1, 5]. Особое внимание уделяется стабильности тока пучка, равномерности эмиссии и долговременной работе при высоких электрических полях [2, 5].

Экспериментальные результаты показывают, что многоострийные полевые катоды обеспечивают более высокий суммарный эмиссионный ток и повышенную эксплуатационную надежность, тогда как одноострийные катоды демонстрируют более высокое качество пучка и пространственную когерентность [2]. Полученные данные подтверждают пригодность полевых эмиссионных катодов для использования в компактных и высокопроизводительных электронных пушках. Результаты работы способствуют оптимизации конструкции электронных пушек для применения в электронной микроскопии, вакуумной микроэлектронике и современных научных приборах.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Фаулер Р., Нордгейм Л. Электронная эмиссия в интенсивных электрических полях. Труды Королевского общества Лондона. Серия А, 1928, т. 119, с. 173–181.
2. Форбс Р. Г. Теория и моделирование полевой эмиссии электронов. Труды Материаловедческого общества (MRS Proceedings), 2011, т. 1357, с. 1–14.
3. Хашим К. И., Мансури Р. А. Полевая эмиссионная микроскопия: принципы, теория и приложения. Ливийский журнал науки и технологий, 2015, т. 6, № 2, с. 45–58.
4. Форбс Р. Г. График Мёрфи–Гуда: лучший метод анализа данных полевой эмиссии. arXiv, 2019, arXiv:1905.07585.
5. Аллам М., Форбс Р. Г., Муса М. С. Применение теста ортодоксии полевой эмиссии к графикам Мёрфи–Гуда. arXiv, 2020, arXiv:2006.07641.

Углеродные модификаторы трения

Шилов М.А.[1,2,3], ***Смирнова А.И.***[1], ***Савилов С.В.***[4], ***Дьячкова Т.П.***[5], ***Столбов Д.Н.***[4], ***Усольцева Н.В.***[1]

e-mail: mshilov@yandex.ru

[1]*ФГБОУ ВО «Ивановский государственный университет», Иваново, Россия*

[2]*ФГБОУ ВО «Ивановский государственный энергетический университет имени В.И. Ленина», Иваново, Россия*

[3]*ФГБОУ ВО «Вятский государственный университет», Киров, Россия*

[4]*«Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова», Москва, Россия*

[5]*ФГБОУ ВО «Тамбовский государственный технически университет», Тамбов, Россия*

Снижение энергоемкости и материальных затрат в процессах промышленного производства и эксплуатации машин и механизмов было и остается в фокусе задач ученых-трибологов [1]. Несмотря на прогресс в создании смазочных материалов (СМ), до сих пор тратятся огромные денежные и материальные ресурсы в связи с их неэффективностью, обусловленной потерями энергии на трение, а также с износом машин и механизмов [2]. Следует отметить, что наибольшее число публикаций и в мире, и у нас в стране относится к исследованию влияния отдельных углеродных наноструктур (УНС) на трибологические свойства преимущественно масел. Пластичные смазочные материалы (ПСМ) с присадками УНС изучаются значительно меньше [3]. Это достаточно четко отражено в обзоре [4]. При этом отдельные типы УНС используются авторами при проведении экспериментов в различных условиях, что порождает противоречие полученных результатов, например [5, 6].

Ассортимент УНС относительно узок, недостаточно исследований проводится с их химически функционализированными структурами, хотя функционализация изменяет гидрофобность/гидрофильность поверхности и может привести к химическому взаимодействию с компонентами базовой смазки. Однако вопрос о физико-химических механизмах управления эффективностью смазочных композиций, содержащих различные виды УНС, остается мало исследованным [1]. Кроме того, при использовании в эксперименте промышленно-выпускаемых ПСМ, у которых состав зачастую неизвестен, трудно установить физические и физико-химические процессы, лежащие в основе тех или иных изменений трибологических свойств при добавках присадок УНС. А это препятствует созданию прогностического подхода к дизайну ПСМ с заданными свойствами.

Анализ литературных данных позволил сформулировать цель данной работы – установление теоретических и экспериментальных закономерностей трения и изнашивания при использовании смазочных материалов с присадками различных аллотропных модификаций углеродных наноструктур с учётом их типа, концентрации и ориентации в смазочном слое.

В качестве базовой основы использованы промышленно-выпускаемые смазочные материалы на основе литиевого загустителя: Claas AGRIGREASE EP2 (импортная) — (**I**), а также отечественные «Газпромнефть» LX EP2 (**II**) и Литол-24 (**III**), а также модельная смазка – вазелин медицинский (VM), в структуру которых вводили присадки УНС различной пространственной организации: 0D, 1D, 2D, 3D. Выбор этого типа ПСМ обусловлен тем, что на сегодняшний день он являются наиболее распространенным и исследованным. В качестве присадок углеродных аллотропов использовано девять УНС: 0D – фуллерен C60, шунгит Sh; 1D – одностенные SWNT и многостенные углеродные нанотрубки MWCN; 2D – оксид графена GO, малослойные графитовые фрагменты LGF и их азот-допированные аналоги N-LGF; 3D – графит (Graphite). Устойчивые смазочные композиции получали путем обработки с применением механических и ультразвуковых методов.

Триботехнические характеристики смазочных материалов с присадками УНС изучали с использованием пяти схем трения: 1 – «кольцо – диск», 2 – «ролик – диск», 3 – «четыре

шарика», 4 – «шарик - плоскость», 5 – «диск – частичный вкладыш». Испытания проводили на машинах трения МТУ-01, СМТ-1, СМЦ-2 и трибометре с функцией интерферометрии.

В качестве меры противоизносных свойств использовали диаметр пятна износа (Dи), противозадирных свойств – индекс задира (Из), несущей способности – критическая нагрузка (Рк), а предельной нагрузочной способности – нагрузка сваривания (Рс). Для исключения выпадающих значений использовали тест Q-Диксона с уровнем значимости 0,05, в котором количество экспериментов составляло $3 < n \leq 10$. Результаты испытаний трех базовых ПСМ и смазочных композиций с УНС приведены на рис. 1.

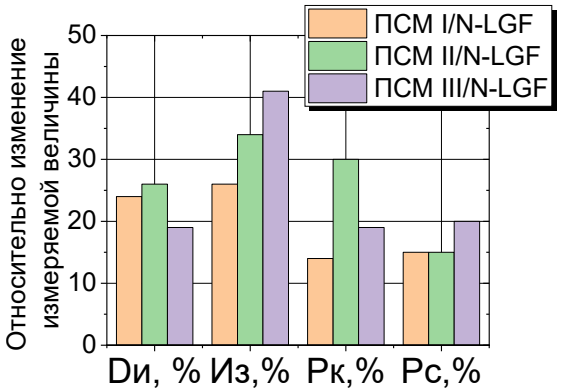


Рис. 1. Относительное изменение величин: диаметра пятна износа (Dи), индекса задира (Из), критической нагрузки (Рк), нагрузки сваривания (Рс)

Варьирование концентрации присадок УНС (от 0,1 до 1,5 мас. %) позволило выявить четкие экстремумы размера диаметров пятен износа. Минимальный диаметр пятен износа наблюдался при концентрации 0,5 мас. %. Снижение или повышение концентрации УНС приводило к увеличению размера диаметра пятна износа для всех изученных дисперсий ПСМ/УНС. При этом снижение величины диаметра пятна износа наблюдается в последовательности: 0D (C_{60}) > 1D (SWCN, MWCN) > 3D (Graphite) > 2D (LGF, GO, N-LGF). Таким образом наилучшие противоизносные, противозадирные характеристики проявили дисперсии с присадками N-LGF.

Анализ полученных данных показал, что с вероятностью 95%, самое значительное уменьшение диаметра пятна износа по сравнению с базовым ПСМ наблюдалось при использовании N-LGF: на 10,5 % у ПСМ II/N-LGF; на 8 % у ПСМ III/N-LGF и на 7,5 % у ПСМ I/N-LGF, что свидетельствует также и о влиянии базового смазочного материала.

Увеличение несущей способности на 30 % наблюдается также для смазочной композиции ПСМ II/N-LGF (0,5 мас.%). Максимальное увеличение индекса задира на 41 % и предельной нагрузки сваривания на 20 % обнаружено для смазочной композиции ПСМ III/N-LGF (0,5 мас.%).

Таким образом, впервые были установлены закономерности влияния типа и концентрации присадок УНС в трех промышлено-выпускаемых ПСМ на антифрикционные и противоизносные характеристики различных пар трения.

Кроме того, для модельной базовой основы – вазелина медицинского (VM) и указанного выше набора УНС были получены последовательности изменения антифрикционных характеристик, которые согласуются с данными, установленными для смесей с промышленно-выпускаемыми ПСМ. Определена общая тенденция возрастания коэффициента трения при вариации аллотропной модификации присадки УНС от 0D к 2D [7].

Наряду с этим, показан важный вклад аллотропной модификации УНС на особенности протекания трибологических процессов для различных режимов смазывания (граничного, эластогидродинамического, гидродинамического) [8].

Финансирование: работа выполнена с финансовой поддержкой Минобрнауки РФ (грант № FZZM-2026-0004).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Parfenov A. S., Berezina E. V., Smirnova A. I., Shilov M. A., Usol'tseva N. V., Gvozdev A. A., Dyachkova T. P., Rozhkova N. N., Savilov S. V. Tribological Properties of Plastic Lubricants in Compositions with Various Carbon Nanostructures. Journal of Friction and Wear, 2019, vol. 40, № 5, pp. 453–460.

2. Holmberg K., Erdemir A. Influence of Tribology on Global Energy Consumption, Costs and Emission. Friction, 2017, vol. 5, pp. 263–284.

3. Шилов М. А., Смирнова А. И., Усольцева Н. В. Влияние типа присадок углеродных наноструктур на ползучесть пластичных смазочных материалов. Графен и родственные структуры: синтез, производство и применение [Электронный ресурс]: материалы V Международной научно-практической конференции. Тамбов, 2023, с. 329–332.

4. Ali I., Basheer A. A., Kucherova A., Memetov N., Pasko T., Ovchinnikov T., Pershin V., Kuznetsov D., Galunin E., Grachev V., Tkachev A. Advances in Carbon Nanomaterials as Lubricants Modifiers. Journal of Molecular Liquids, 2019, vol. 279, pp. 251–266.

5. Bhaumik Sh., Prabhu S., Kingsly S. J. Analysis of Tribological Behavior of Carbon Nanotube Based Industrial Mineral Gear Oil 250cSt Viscosity. Advances in Tribology, 2014, vol. 2014, pp. 1–8.

6. Muzakkir S. M., Lijesh K. P., Hirani H. Influence of Surfactants on Tribological Behaviors of MWCNTs (Multi-Walled Carbon Nanotubes). Tribology — Materials, Surfaces and Interfaces, 2016, vol. 10, pp. 723–728.

7. Parfenov A. S., Berezina E. V., Shilov M. A., Smirnova A. I., Usol'tseva N. V., Tkachev A. G., Burkov A. A., Rozhkova N. N. Influence of Various Carbon Allotropes on Tribological and Rheological Characteristics of Model Lubricating Systems. Journal of Friction and Wear, 2021, vol. 42, № 3, pp. 217–224.

8. Shilov M. A., Smirnova A. I., Kupreenko S. Yu., Gvozdev A. A., Rozhkova N. N., Dyachkova T. P., Stolbov D. N., Savilov S. V., Usol'tseva N. V. Mechanism of Lubricating Action of Model Systems with Additives of Carbon Nanostructures under Hard Friction Conditions. Journal of Friction and Wear, 2024, vol. 45, № 6, pp. 337–343.

Квантовая ёмкость двумерных плёнок графен/$LiCoO_2$ при различном содержании углерода

Шунаев В.В.[1], ***Петрунин А.А.***[1], ***Глухова О.Е.***[1,2]

e-mail: shunaevvv@sgu.ru

[1]*ФГБОУ ВО «Саратовский национальный исследовательский государственный университет имени Н.Г. Чернышевского», Саратов, Россия*

[2]*Первый Московский государственный медицинский университет имени И.М. Сеченова, Россия, 119991, Москва, Россия*

Современное развитие химических источников тока требует создания электродных материалов с высокой удельной ёмкостью, быстрой кинетикой заряда-разряда и длительным цикличным ресурсом. Композиты на основе графена и оксида лития-кобальта $LiCoO_2$ (LCO) сочетают высокую теоретическую ёмкость LCO с гибкостью и проводимостью графена. Особый интерес представляют двумерные плёнки, в которых достигается минимальный путь диффузии лития и эффективное использование активного материала. В таких системах важную роль играет квантовая ёмкость, определяющая нефарадеевскую составляющую полной ёмкости электрода. Целью работы является численная оценка квантовой ёмкости и удельного заряда двумерных плёнок графен/LCO в зависимости от массовой доли углерода.

Исследование выполнено в рамках метода теории функционала плотности (DFT) с использованием программного пакета SIESTA 5.2.2. Применялось обобщённое градиентное приближение (GGA) в функционале PBE, учёт ван-дер-ваальсовых взаимодействий по схеме DFT-D3. Для атомов Co использовалась поправка Хаббарда. Построены суперъячейки, согласованные по параметрам решётки, с варьируемым числом слоёв графена от одного до восьми, что обеспечило изменение массового соотношения m(LCO):m(G) от 8:1 до 1:1. Квантовая ёмкость рассчитывалась через плотность электронных состояний с учётом теплового уширения.

Формирование всех рассмотренных суперъячеек имеет экзотермический характер. С увеличением доли графена энергия связи уменьшается по модулю, а межслойное расстояние между LCO и верхним слоем графена возрастает от 2.24 до 2.36 Å. Уровень Ферми смещается в область более отрицательных значений после добавления второго слоя, а затем изменяется незначительно. Вблизи потенциала 0 В квантовая ёмкость композита возрастает с увеличением числа слоёв графена: от 113.0 Ф/г для одного слоя (m(LCO):m(G) = 8:1) до 245.0 Ф/г для восьми слоёв (1:1). Это обусловлено вкладом графена в плотность электронных состояний вблизи уровня Ферми. При приближении к границам электрохимического окна воды (±0.6 В) и особенно ионной жидкости (±1.2 В) наблюдается обратная тенденция: квантовая ёмкость снижается с ростом массовой доли углерода. В диапазоне 0.5–0.6 В зафиксирован резкий рост ёмкости, указывающий на высокую скорость заряда в этой области. Для всех рассмотренных составов отношение удельных зарядов на границах рабочего диапазона σ_A/σ_C составило менее 0.71 как для водного электролита, так и для ионной жидкости, что свидетельствует о ярко выраженных катодных свойствах материала. С увеличением доли графена это отношение незначительно снижается, сохраняя катодный характер. Впервые получены атомные суперъячейки двумерных плёнок графен/LCO с варьируемым массовым соотношением компонентов. Показано, что увеличение массовой доли углерода приводит к снижению квантовой ёмкости в рабочих диапазонах электролитов и уменьшению модуля энергии связи. Установлено, что методы Вороного и Хиршфилда дают согласованные и физически обоснованные результаты для анализа зарядового состояния, в отличие от метода Малликена. Полученные результаты позволяют рассматривать двумерные плёнки

графен/LCO как перспективные катодные материалы для суперконденсаторов как с водными электролитами, так и с ионными жидкостями.

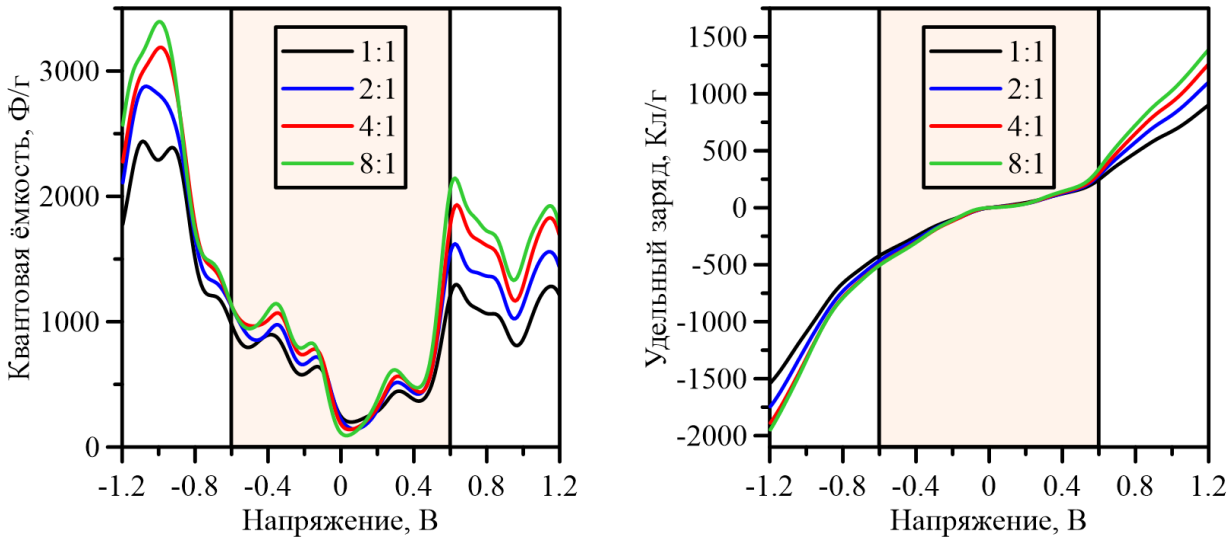


Рис. 1. Квантовая ёмкость и удельный заряд двумерных плёнок G/LCO в зависимости от массового соотношения компонентов m(G):m(LCO).

Финансирование: работа финансировалась Российским научным фондом (проект № 25-22-00290).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Chao D. et al. Electronic structure and magnetic properties of novel rare-earth intermetallic compounds. J. Alloys Compd., 2019, vol. 785, p. 557.

2. Wen J. et al. Ultrafast charge transfer dynamics in 2D heterostructures: A femtosecond spectroscopy study. Chem. Phys. Lett., 2021, vol. 775, p. 138666.

3. Wang B., Li S. L., Truhlar D. G. Accurate prediction of reaction barriers using machine-learning-enhanced density functional theory. J. Chem. Theory Comput., 2014, vol. 10, p. 5640.

4. Soler J. M. et al. Ab initio simulation of structural phase transitions in perovskite materials under high pressure. J. Phys.: Condens. Matter, 2002, vol. 14, p. 2745.

5. van Elp J. et al. X-ray absorption spectroscopy of transition metal oxides: Electronic structure and ligand effects. Phys. Rev. B, 1991, vol. 44, p. 6090.

6. Liang Q. et al. Single-atom catalysts for CO_2 reduction: Tuning selectivity via local coordination environment. Chem. Phys. Lett., 2024, vol. 851, p. 141189.

Разработка программы для решения задачи о прохождении квантовой частицы через потенциальный барьер произвольной формы методом матриц переноса

***Эль Занин А.Р.*[1], *Яцышен В.В.*[1]**

e-mail: aelzanin@volsu.ru
[1]*ФГАОУ ВО «Волгоградский государственный университет», Волгоград, Россия*

Управление током, протекающим в различных режимах, например, туннельном или баллистическом, в наномасштабных структурах является сложной научной и технологической задачей, и от ее решения зависят темпы роста производительности электронных устройств. Проблема обеспечения эффективной модуляции тока в низкоразмерных структурах, в т. ч. графене, выступает в качестве лимитирующего фактора для внедрения научно-технических разработок в этой сфере для создания реальных продуктов микроэлектронной промышленности. Исследователи отмечают низкое значение отношения токов в закрытом и открытом состоянии (что, по сути дела, можно назвать глубиной модуляции) в транзисторах на основе графена в традиционной планарной конфигурации [1, 2]. Для преодоления подобных ограничений предлагается конструировать транзисторы на основе гетероструктур, содержащих графен. Это приводит к формированию на границах раздела сред (интерфейсах) потенциальных барьеров, управление высотой которых возможно посредством приложения напряжения на затворе. При этом следует отметить, что протекающий в канале транзистора ток складывается из туннельного тока и тока термоэлектронной эмиссии, обусловленного надбарьерным пробросом носителей заряда [3]. Таким образом, управление высотой потенциального барьера позволяет осуществлять модуляцию тока, характеризуемую значительной по величине глубиной, достигающей 4 порядков [4]. Очевидной является связь между прозрачностью барьера в канале транзистора и плотностью протекающего тока, соответственно, для проектирования подобного устройства необходимо решить квантово-механическую задачу о прохождении квантовой частицы через барьер.

Приведенные выше положения обуславливают чрезвычайную важность решения задач о туннелировании и надбарьерном прохождении квантовых частиц через системы, состоящие из одного или нескольких потенциальных барьеров различной формы, для описания процессов модуляции тока в наноразмерных устройствах и создания новых приборов наноэлектроники. **Целью** настоящей работы является решение квантово-механической задачи о туннелировании и надбарьерном прохождении квантовых частиц через потенциальные барьеры методом матриц переноса для нахождения зависимости коэффициента прозрачности одиночного барьера или многобарьерной системы, заданных как в виде непрерывных, так и кусочных функций, от энергии падающей квантовой частицы.

В настоящей работе рассматривается стационарная задача о прохождении частицы через одномерный потенциальный барьер, для решения которой необходимо решить уравнение Шредингера вида

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2}+U(x)\psi=E\psi,$$

где ħ – приведенная постоянная Планка, m – масса квантовой частицы, ψ – волновая функция квантовой частицы, E – энергия квантовой частицы. Для потенциала U(x), имеющего произвольный вид, подобная задача может быть решена с использованием метода матриц переноса, основанного на разбиении исходного потенциала на систему следующих друг за другом прямоугольных потенциальных барьеров, т. е. его аппроксимации потенциалом ступенчатой формы. Применение граничных условий, заключающихся в непрерывности волновой функции и ее первой производной во всей действительной области, позволяет

рассчитать матрицу переноса M, связывающую амплитуды падающей, отраженной и прошедшей волн вероятности:

$$\begin{pmatrix} 1 \\ B_0 \end{pmatrix} = M \begin{pmatrix} A_{N+1} \\ 0 \end{pmatrix},$$

где B_0 – амплитуда отраженной волны вероятности, A_{N+1} – амплитуда прошедшей через систему из N барьеров волны вероятности. Амплитуда падающей волны вероятности принята равной 1.

В качестве входных данных для программы, решающей данную задачу, выступают масса квантовой частицы, координаты левой и правой границ барьера, функция, описывающая потенциал U(x), число аппроксимирующих прямоугольных барьеров N, диапазон значений энергии падающей частицы. В случае рассмотрения потенциала, описываемого с помощью кусочной функции, программа предложит поочередно вводить координаты границ каждого участка кусочной функции и аналитические выражения, описывающие ее поведение на них. Итогом работы программы являются выводимые на экран графики, демонстрирующие вид аппроксимирующего потенциала и зависимости коэффициента прозрачности и коэффициента отражения от энергии падающей частицы, а также текстовые файлы, дублирующие информацию касаемо коэффициентов прозрачности и отражения.

Таким образом, в настоящей работе была построена математическая модель, позволяющая решать одномерное уравнение Шредингера с помощью метода матриц переноса для описания процессов туннелирования и надбарьерного прохождения квантовой частицы через одиночные барьеры и многобарьерные системы произвольной формы, и в соответствии с ней написана программа на языке Scilab. Взаимодействие с пользователем в данной программе реализовано в виде диалога в командном окне, что позволяет использовать данную программу для научных и учебных задач, в т. ч. связанных с разработкой критически важных компонентов наноэлектроники.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Антонова И. В., Котин И. А., Небогатикова Н. А., Принц В. Я. Самоформирующиеся латеральные гетероструктуры на основе графена с возможностью модуляции тока на 4–5 порядков. Письма в Журнал технической физики, 2015, т. 41, № 19, с. 64–72.

2. Давидович М. В., Глухова О. Е., Слепченков М. М. Терагерцевый транзистор на основе графена. Известия Саратовского университета. Новая серия. Серия Физика, 2017, т. 17, № 1, с. 44–54.

3. Свинцов Д. А., Вьюрков В. В., Лукичев В. Ф., Орликовский А. А., Буренков А., Охснер Р. Туннельные полевые транзисторы на основе графена. Физика и техника полупроводников, 2013, т. 47, № 2, с. 244–250.

4. Logoteta D., Fiori G., Iannaccone G. Graphene-based lateral heterostructure transistors exhibit better intrinsic performance than graphene-based vertical transistors as post-CMOS devices. Scientific Reports, 2014, vol. 4, № 1, p. 6607.

Влияние состава и морфологии углеродных наноматериалов на антикоррозионные свойства композитных покрытий на основе поливинилхлорида

Яковлев С.В.[1], ***Суслова Е.В.***[2], ***Иванов А.С.***[2]

e-mail: yakovlevserguei@rambler.ru
[1] *ИОНХ РАН им. Н.С. Курнакова, Москва, Россия*
[2] *Химический факультет МГУ имени М.В. Ломоносова, Москва, Россия*

Коррозия и обрастание днища живыми организмами – общемировые проблемы, в результате которых эксплуатация и обслуживание судов становятся дорогими и экологически небезопасными. Для увеличения межремонтного интервала, снижения стоимости обслуживания и увеличения скорости хода поверхность корпусов покрывают различными покрытиями, уменьшающими трение и препятствующими коррозии и обрастанию. В качестве основ таких полимерных покрытий широко растпространены поливинилхлорид, эпоксидные смолы, полиуретан, полианилин и др. В данные матрицы могут вводить соединенияCu(I), Ag, Au, Zn, Sn, Pb, Ce, Ti, As, Cr, что способствует увеличению сроку службы покрытия за счет их биоцидного действия, а также уменьшению коррозии. Однако эти добавки являются неэкологичными.

В настоящей работе в качестве антикоррозионных добавок к коммерчески доступной сополимеро-винилхлоридной эмали апробированы поверхностно-окисленные углеродные нанотрубки (УНТ) и малослойные графеновые фрагменты (МГФ), а также допированные атомами N и P МГФ. Изучены взаимосвязи между составом и морфологией углеродынх наноматериалов (УНМ) и коррозионной устойчивостью содержащих их покрытий. Для этого УНМ (0.05 масс. %) диспергировали в коммерчески доступной сополимеро-винилхлоридной эмалью марки ХС–5226 (ООО «НТК «Спецэмаль»», Россия), после чего кистью наносили на стальные пластины марки РСА (ГОСТ Р 52927-2023, ПАО «Новолипецкий металлургический комбинат», Россия) размером 100*135*4 мм. В качестве образцов сравнения наносили эмаль ХС–5226 без УНМ, формируя покрытия с толщинами 50 и 100 мкм.

Электрохимические испытания проводили в трехэлектродных стеклянных электрохимических ячейках. В качестве электролита использовали раствор 3.5 масс. % NaCl в дистиллированной воде. Рабочим электродом служили, собственно, стальные пластины с нанесенным покрытием, противоэлектродом – Pt, а электродом сравнения – хлор-серебряный электрод. Антикоррозионный свойства оценивали с помощью вольтамперных характеристик материалов, поляризации электродов и импедансной спектроскопии. Сами материалы и композиты на их основе характеризовали методами сканирующей и просвечивающей электронной микроскопии, РФЭС, низкотемпературной азотной порометрии.

В качестве основных причин коррозии стали под покрытием можно считать (1) плохую адгезию покрытия к поверхности и/или его повреждение и (2) диффузию раствора электролита в толщину покрытия и растворение стали с образованием ржавчины и диффузией Fe^{2+} в раствор. Сталь без покрытия является проводящим материалом, а скорость коррозии максимальна и составляет 6.202 мм·год$^{-1}$. Для все типов добавок на основе МГФ и гетерозамещенных атомами N или P МГФ в составе поливинилхлоридных красок на границе раздела электролит/покрытие ограничение переноса заряда по механизму диффузионного сопротивления Варбурга. При использовании УНТ в качестве добавки систему можно рассматривать как идеальный суперконденсатор. Именно для этого покрытия обнаружена одна из самых медленных скоростей коррозии, равная $0.998 \cdot 10^{-3}$ мм·год$^{-1}$.

Для обоснования влияния УНМ на антикоррозионные свойства покрытий необходимо учитывать их состав и морфологический тип. Окисление поверхности УНМ, как правило, приводит к лучшей диспергируемости их в составе полимеров. Известно, что

поливинилхлорид имеет высокоорганизованную структуру, введение в его состав УНМ способствует реорганизации таким образом, что структуры не случайным образом распределяется в полимере. Улучшение свойств материала достигается за счет высокой степени влияния развитой поверхности УНМ на упорядочение расположения элементов в системах со случайно формируемой структурой. В настоящей работе введение именно поверхностно-окисленных МГФ и УНТ привело к самому существенному улучшению антикоррозионных свойств, что, вероятно, определяется сочетанием текстурных характеристик и наличию кислородсодержащих поверхностных групп, увеличивающих сопротивление материалов.

Финансирование: работа выполнена в рамках государственного задания Министерства науки и высшего образования РФ (АААА-А21-121011990019-4).

Моделирование эволюции лазерных пучков в углеродных нанотрубках с примесями в условиях двухфотонного поглощения

Янюшкина Н.Н.[1]

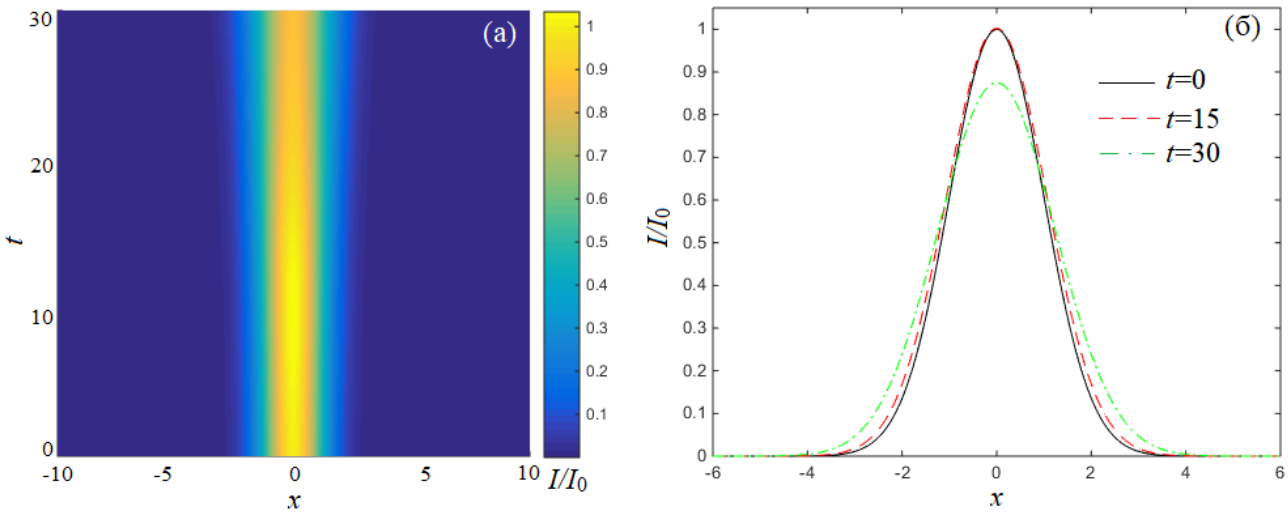
e-mail: yana_nn@volsu.ru
ФГАОУ ВО «Волгоградский государственный университет», Волгоград, Россия

Актуальность моделирования эволюции лазерного излучения в средах на основе примесных углеродных нанотрубок (УНТ) [1] с учетом двухфотонного поглощения [2] диктуется потребностями в создании новых элементов фотоники. УНТ привлекают внимание исследователей благодаря своим выдающимся нелинейно-оптическим свойствам, химической стойкости и высокому быстродействию, что делает их идеальными кандидатами для использования в лазерных затворах, оптических ограничителей и элементов интегральной фотоники [3, 4]. Двухфотонное поглощение в таких структурах выступает ключевым процессом, определяющим нелинейный отклик материала при воздействии мощного лазерного излучения, и его понимание необходимо как для фундаментальных исследований электронной структуры нанотрубок, так и для практических приложений, связанных с управлением световыми потоками на наноуровне.

Двухфотонное поглощение в углеродных нанотрубках реализуется как процесс, при котором электрон переходит в возбужденное состояние через виртуальный промежуточный уровень с одновременным поглощением двух фотонов, причем вероятность такого перехода существенно зависит от поляризации излучения относительно оси нанотрубки и достигает максимума при параллельной ориентации. Важной особенностью является то, что правила отбора для двухфотонных переходов отличаются от однофотонных, что позволяет зондировать состояния, недоступные в линейной оптике, и получать более полную информацию об электронном спектре материала.

Присутствие примесей и структурных дефектов модифицирует локальное электронное окружение и создает дополнительные уровни в запрещенной зоне, что может приводить как к усилению двухфотонного поглощения за счет резонансного увеличения вероятности переходов, так и к его подавлению вследствие разупорядочения и нарушения когерентности процессов.

Для описания распространения лазерных импульсов в средах, содержащих углеродные нанотрубки, применяется нелинейное уравнение Шредингера, дополненное членами, учитывающими многофотонное поглощение. Влияние примесей учитывается при помощи закона дисперсии электронов в УНТ [5].



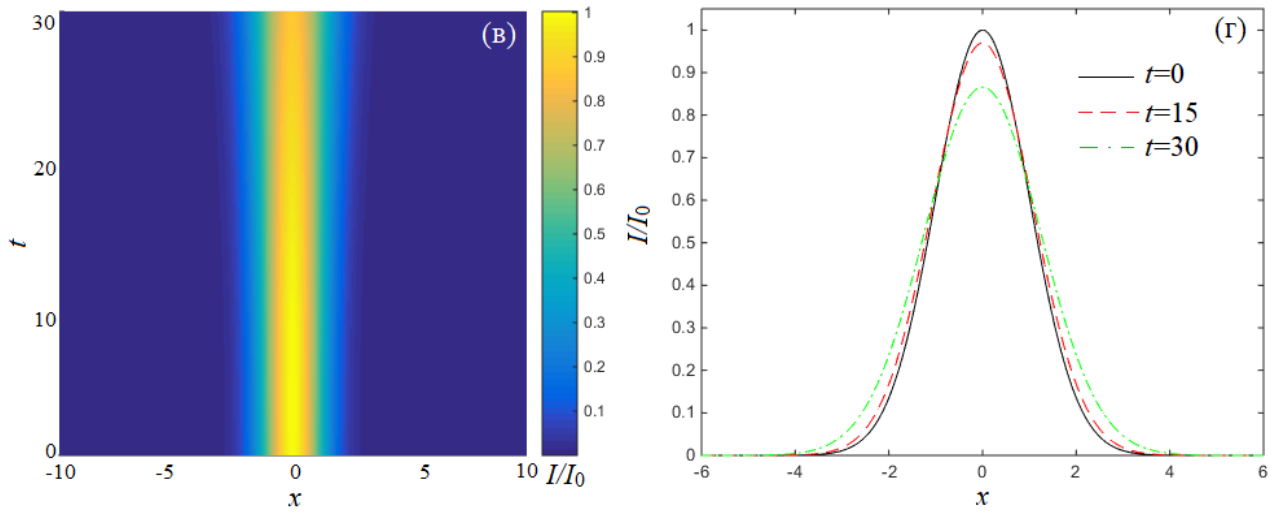


Рис. 1. Пространственное распределение интенсивности пучка: (а, б) в среде из чистых углеродных нанотрубок; (в, г) в среде из примесных УНТ. На рисунках (б) и (г) представлены профили пучка для разных значений t. I_0 – начальная интенсивность.

Численное моделирование демонстрирует, что при распространении мощных фемтосекундных импульсов двухфотонное поглощение приводит к снижению пиковой интенсивности и диссипации энергии, причем характер эволюции определяется соотношением между дисперсионными и нелинейными эффектами.

Финансирование: Исследование выполнено при поддержке Российского научного фонда (РНФ) (грант № 23-71-00016, https://rscf.ru/project/23-71-00016/). Работа выполнена с использованием оборудования Центра коллективного пользования сверхвысокопроизводительными вычислительными ресурсами МГУ имени М.В. Ломоносова.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Iijima S. Helical microtubules of graphitic carbon. Nature, 1991, vol 354, pp. 56-58.

2. Barros E.B., Capaz R.B., Jorio A., Samsonidze G.G., Souza Filho A.G., Ismail-Beigi S., Spataru C.D., Louie S.G., Dresselhaus G., Dresselhaus M.S. Selection rules for one- and two-photon absorption by excitons in carbon nanotube. Phys. Rev. B, 2006, vol. 73, P. 241406(R).

3. Vivien L., Lançon P., Riehl D., Hache F., Anglaret E. Carbon nanotubes for optical limiting. Carbon, 2022, vol. 40, Issue 10, pp. 1789–1797.

4. Nibhanupudi S.S.T., Roy A., Veksler D., Coupin M., Matthews K.C., Disiena M., Ansh, Singh J.V., Gearba-Dolocan I.R., Warner J., Kulkarni J.P., Bersuker G., Banerjee S.K. Ultra-fast switching memristors based on two-dimensional materials. Nature Communications, 2024, vol. 15, P. 2334.

5. Kuvshinov E.A., Trofimov R.R., Konobeeva N.N. Simulation of the evolution of laser beams in impurity carbon nanotubes using the Madelung approach. Computer Optics, 2025, vol. 49, Issue 2, pp. 200-204.

Влияние ориентации магнитного поля на резонансные свойства интегрированной магнонной структуры с кольцевым ЖИГ-резонатором

***Яснев Н.Ю.*[1], *Манышева А.А.* [1], *Жумабекова К.Е.* [1], *Садовников А.В*[1]**

e-mail: yasnev06@mail.ru

1Саратовский национальный исследовательский государственный университет имени Н.Г. Чернышевского, Саратов, Россия

В работе исследовано распространение спиновых волн в интегрированной магнонной структуре на основе плёнки железо-иттриевого граната (ЖИГ), содержащей квадратный кольцевой микрорезонатор, непосредственно соединённый с входным и выходным микроволноводами [1]. Численное моделирование выполнено методом решения уравнения Ландау-Лифшица-Гильберта с использованием пакета MuMax3 [2].

Внешнее магнитное поле $\boldsymbol{H_0}$ = 1.2 кЭ прикладывалось в плоскости структуры. Управление резонансными характеристиками осуществлялось варьированием угла φ между направлением поля и продольной осью волноводов. Рассматривались углы φ = -15°, 0°, +15° (квази-продольная ориентация) и φ = 75°, 90°, 105° (квази-поперечная ориентация).

При отклонении поля на ±15° в углах квадратного контура возникают локальные неоднородности эффективного поля, обусловленные перераспределением размагничивающих полей. Это приводит к изменению локальных условий распространения спиновых волн и модификации интерференционной картины в замкнутом контуре [3].

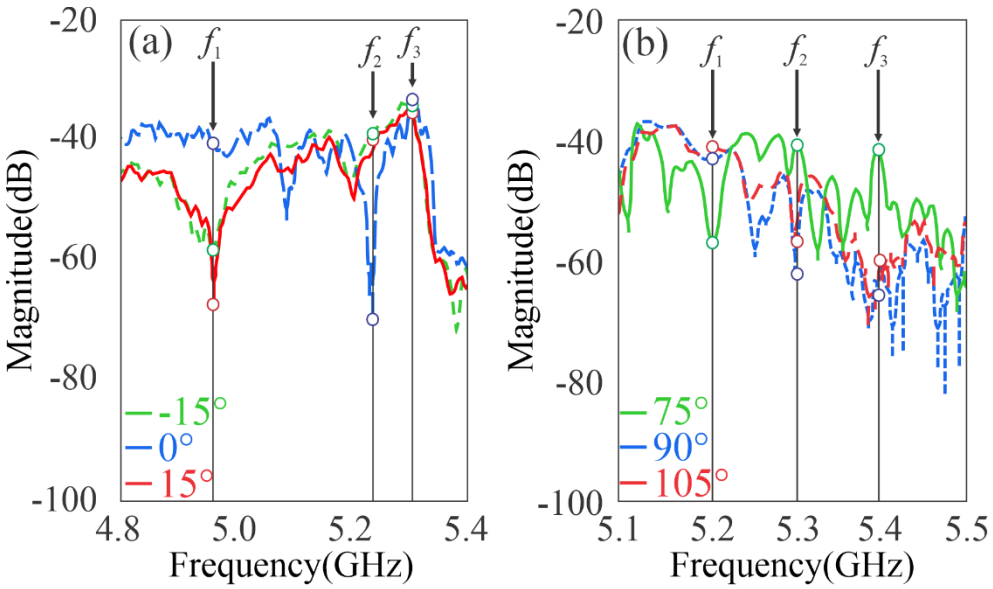


Рис. 1. Амплитудно-частотные характеристики кольцевого ЖИГ-микрорезонатора при различной ориентации внешнего магнитного поля: (a) φ = -15° … 15°; (b) φ = 75° … 105°.

Анализ амплитудно-частотных характеристик подтвердил возможность управляемого сдвига резонансных пиков при варьировании угла φ. При симметричной ориентации поля наблюдаются чёткие резонансные пики с высокой добротностью, тогда как при угловых отклонениях происходит смещение частот максимального прохождения сигнала в диапазоне 4.8-5.8 ГГц.

Анализ пространственных распределений динамической намагниченности выявил формирование стоячих волн с выраженными узлами и пучностями внутри кольцевого контура. При φ = 90° фазовый профиль обладает зеркальной симметрией, что указывает на возбуждение чистых азимутальных мод. При φ = 75° и 105° симметрия нарушается, что свидетельствует о возбуждении смешанных мод. Нарушение зеркальной симметрии интерференции приводит к

перераспределению энергии между входным и выходным волноводами и сдвигу резонансной частоты.

Таким образом, ориентация внешнего магнитного поля выступает эффективным бесконтактным параметром управления резонансными свойствами магнонной структуры без изменения её геометрии. Полученные результаты создают предпосылки для разработки энергоэффективных перестраиваемых фильтров и логических элементов [4].

Финансирование: Работа выполнена при поддержке гранта РНФ № 23-79-30027.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Barman A., Chumak A. V., Neusser S. et al. The 2021 magnonics roadmap. Journal of Physics: Condensed Matter, 2021, vol. 33, no. 41, p. 413001.

2. Vansteenkiste A., Leliaert J., Dvornik M. et al. The design and verification of MuMax3. AIP Advances, 2014, vol. 4, no. 10, p. 107133.

3. Odintsov S. A., Sheshukova S. E., Nikitov S. A., Sadovnikov A. V. Lateral and vertical spin-wave transport in a multimode magnonic ring coupler. Physical Review Applied, 2024, vol. 22, no. 1, p. 014042.

4. Rabus D. G. Integrated Ring Resonators: The Compendium. Berlin, Heidelberg: Springer, 2007, 256 p.

Гибридный алмазографитовый нанокомпозит для детектирования газов

Вениг С.Б.[1], Синев И.В.[1,2], Яфаров Р. К.[1,2]

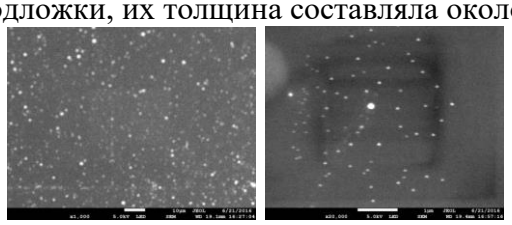
e-mail: pirpc@yandex.ru

[1]Саратовский государственный университет им. Н. Г. Чернышевского, Саратов, Россия

[2]Саратовский филиал ИРЭ им. В. А. Котельникова РАН, Саратов, Россия

Одной из важнейших проблем в развитии адаптивных потребностей общества является мониторинг окружающей среды и продуктов жизнедеятельности человека. Наиболее востребованными являются высокочувствительные газовые сенсоры, работающие при комнатной температуре. Они необходимы, в частности, для неинвазивной диагностики заболеваний путем обнаружения молекул ацетона, формальдегида, сероводорода, этанола и др. в выдыхаемом воздухе, увеличенная концентрация которых у пациентов коррелирует с такими заболеваниями, как диабет, халитоз, рак легких, алкогольная болезнь печени и проч. Выбор материалов, на основе которых можно решить задачу создания хеморезисторов, работающих при комнатной температуре, ограничен структурами из углерода, такими, как углеродные нанотрубки [1, 2], графен [3] и его производные [4]. Их недостаток в том, что энергия связи с хемосорбированной молекулой имеет тот же порядок величины, что и энергия связи С–С. Поэтому попытка десорбировать аналит с поверхности приводит к разрушению самого материала. Невысокие устойчивость к загрязнению и селективность являются ключевыми нерешенными проблемами для их применения в клинической химии, при контроле качества пищевых продуктов, очистке сточных вод и биопереработке. Цель работы – получение и исследование возможности использования алмазографитовых пленочных структур в создании газочувствительных сенсорных устройств для детектирования составов воздушной атмосферы при комнатных температурах.

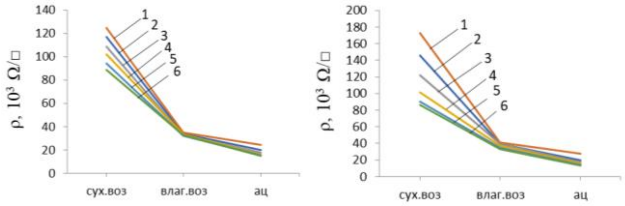
Гибридные алмазографитовые пленочные композиты получены с использованием микроволновой плазмы в диапазоне давлений паров этанола между синтезом графитовых и поликристаллических алмазных пленок [5]. Процесс проводился в условиях малой адсорбции при температуре подложки 300 °С и давлении паров этанола около 0.05 Па. Пленки осаждались на поликоровые подложки, их толщина составляла около 100 нм (рис. 1).



а) б)

Рис. 1. СЭМ – изображения алмазографитовых композитов с поверхностной плотностью наноалмазных кристаллитов 10^6–10^8 см$^{-2}$ при различных увеличениях: а) ×1000; б) ×20000.

Рентгеноструктурные исследования показали присутствие включений мелкокристаллической фазы графита (002), алмазоподобной фазы кубической ориентации (111) и гексагональных решеток различных структурных модификаций (лонсдейлит, С(20Н) и др.). Результаты рентгеноструктурного анализа подтверждены данными КРС. Для полученных структур характерным является ярко выраженный двухпиковый спектр: сильной линии в области 1330 см$^{-1}$, которая свидетельствует о присутствии алмазной фазы, и второго пика в области 1580 см$^{-1}$, который указывает на присутствие графита, как кристаллического, так и аморфизованного. Исследованиями газочувствительных свойств композитов установлено, что при воздействии паров воды удельные поверхностные сопротивления в зависимости от температуры детектирования уменьшаются по отношению к сухому воздуху более, чем в 3 раза, при воздействии паров ацетона в 6-7 раз (рис.2).



а) б)

Рис. 2. Зависимости удельных поверхностных сопротивлений от напряжения инжекции, В: 1-10, 2- 20, 3-30, 4-40, 5-50, 6- 60 и состава воздушной атмосферы (сухой, влажный воздух, пары ацетона) при различных температурах, С°: а – 30; б - 80 С°.

При хемосорбции инородных атомов и молекул электронейтральность кристаллитов алмаза обеспечивается возникновением у поверхности слоя объемного заряда, нейтрализующего поверхностный заряд. Толщина слоя принимается равной дебаевской длине экранирования. При размерах кристаллитов меньше дебаевской длины они обладают только поверхностной (металлической) проводимостью, которая обусловлена величиной поверхностного заряда, которая, в свою очередь, характеризует их адсорбционную способность и определяется предельно высоким числом нескомпенсированных связей на поверхности наноалмазов. Такие поверхностные состояния играют существенную роль для адсорбции и процессов поверхностного катализа химических реакций. Поставка электронов на поверхностные уровни нанокристаллитов осуществляется из графитовой матрицы или при хемосорбции атомов и молекул окружающей атмосферы, вследствие протекания поверхностных реакций. Оценка размера кристаллитов, при котором проводимость обусловлена только процессами в поверхностных зонах для кремния при $n_o \leq 10^{17}$ см$^{-3}$ дает L > 100 нм [6]. В связи с большим значением ε для алмаза, толщина обедненного слоя в нем больше, а значит больше и размер кристаллита, при котором проводимость обусловлена только процессами в поверхностных зонах. С уменьшением размеров кристаллитов увеличиваются их поверхностная энергия и роль поверхностных состояний. Это увеличивает их адсорбционную способность и чувствительность к атомам и молекулам окружающей среды при низких температурах.

Таким образом, в алмазографитовых нанокомпозитах с размерами кристаллитов до 100 нм в результате размерного квантования нулевая энергия электронов существенно превышает тепловую кинетическую энергию. Повышенная собственная энергия обеспечивает реализацию дополнительных и эффективных механизмов обменного взаимодействия электронов при хемосорбции инородных атомов окружающей среды, обеспечивая высокие каталитическую активность, селективность и скорость реакции отклика. Полученные результаты могут быть полезны для создания новых высокочувствительных композитных газовых сенсоров.

Финансирование: работа выполнена при поддержке госзадания Минобрнауки России в сфере научной деятельности (проект № FSRR-2023-0008).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. EP Application EP 1887347. Gas Sensor Using Carbon Nanotubes. Publication date: 2008-02-13. Inventor: Smith J. A. Assignee: Nanotech Sensors Ltd.

2. Patent Application 20110163296. CNT-Based Sensors: Devices, Processes and Uses Thereof. Publication date: 2011-08-11. Inventor: Wang L., Chen H. Assignee: Global Nanomaterials Inc.

3. Joshi M., Singh R. P. Studies of CNT and Polymer Based Gas Sensor. Sensors & Transducers Journal, 2010, vol. 122, pp. 66–71.

4. US Patent Application 20110303882. Polymer Composites Having Highly Dispersed Carbon Nanotubes. Publication date: 2011-12-22. Inventor: Johnson R. M., Brown T. L. Assignee: Advanced Materials Corp.

5. Яфаров Р. К. Физика СВЧ вакуумно-плазменных нанотехнологий. Москва: Физматлит, 2009, 216 с. ISBN: 978-5-9221-0123-5. Тираж: 1 000 экз.

6. Покровский Я. Е. Журнал технической физики (ЖТФ), 1954, т. 24, вып. 1, с. 42–48.

Исследование сенсорных свойств модифицированных азотом углеродных нанотрубок на оксид азота

Алимов Н.Н.[1], ***Борознин С.В.***[1], ***Григорьев А.Д.***[1]

e-mail: EAC4529@bk.ru

[1]*Волгоградский государственный университет, Волгоград, Россия*

В данной работе рассматривалось теоретическое исследование сенсорных свойств модифицированных оксидами металлов углеродных нанотрубок. В данной работе был смоделирован процесс добавления молекулы оксида азота к полупроводниковой нехиральной (6,0) CN нанотрубки типа «зиг-заг», содержащей 50% атомов углерода и 50% атомов азота. Моделирование выполнено с помощью программ GaussView и Gaussian с использованием расчетного метода DFT, функционала B3LYP и базисного набора 6-31G. Путём компьютерного моделирования были получены параметры взаимодействия, полученные методом DFT. В результате чего был сделан вывод о том, что система углеродная нанотрубка модифицированная азотом – диоксид азота образует стабильный химический комплекс.

Наиболее широко известными являются сенсоры газов резистивного типа, в том числе, основанные на полупроводниковых газочувствительных материалах (ГЧМ). К таким сенсорам можно также отнести сенсоры, основанные на ГЧМ, модифицированных углеродными нанотрубками (УНТ). Кроме того, они характеризуются размерами, позволяющими создавать нанокомпозитные материалы. ГЧМ на основе УНТ способны определять довольно широкий спектр газов-поллютантов (оксиды углерода, оксиды азота, аммиак и др.) [**Ошибка! Источник ссылки не найден.**].

Углеродные нанотрубки представляют собой протяженные структуры, состоящие из свернутых в однослойную (ОСНТ) или многослойную (МСНТ) трубку графитовых слоев. [**Ошибка! Источник ссылки не найден.**]. Благодаря уникальным механическим, физическим и химическим свойствам углеродные нанотрубки находят все большее применение в новых материалах, обладающих высокой прочностью (это наполнители в полимерах, улучшающие электро- и теплопроводящие свойства, эмиттеры в электронных устройствах, в микроэлектронике, топливных элементах, сорбционных материалах, катализаторах, суперконденсаторах, сенсорах) [**Ошибка! Источник ссылки не найден.**].

Результаты исследования

Был смоделирован процесс взаимодействия модифицированной N-УНТ с молекулой диоксида азота (рис. 1а). В результате была построена зависимость энергии взаимодействия диоксида азота с N-УНТ. На рисунке 1б отчетливо виден один минимум.

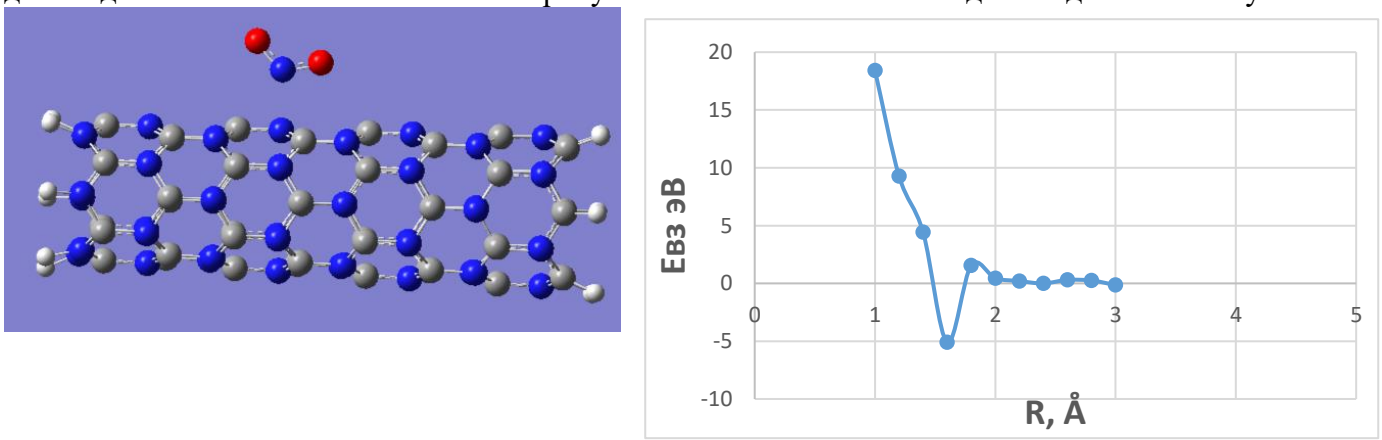


Рис. 1 Модель взаимодействия модифицированной N-УНТ с молекулой диоксида азота. Зависимость энергии сорбционного и сенсорного взаимодействия N-УНТ с диоксидом азота.

Вывод

На основании проведенного компьютерного моделирования было установлено наличие сорбционного и сенсорного взаимодействия между наносистемой N-УНТ и диоксидом азота.

Таким образом, модифицированные азотом углеродные нанотрубки могут найти своё применение в таких отраслях науки, как химия, ракетостроение, космонавтика, машиностроение и так далее. Например, в машиностроении в качестве для активного слоя блока-носителя катализатора можно использовать углеродные нанотрубки, в качестве сорбентов вредных газов, что позволит удешевить стоимость данной запчасти.

Следовательно, углеродным нанотрубкам можно найти применение в различных отраслях производства, науки и техники. Что буквально уменьшит стоимость производства и увеличит запас прочности соответствующей детали, из-за своих уникальных свойств, благодаря уникальным механическим, физическим и химическим свойствам углеродные нанотрубки находят все большее применение в новых материалах, обладающих высокой прочностью (это наполнители в полимерах, улучшающие электро- и теплопроводящие свойства, эмиттеры в электронных устройствах, в микроэлектронике, топливных элементах, сорбционных материалах, катализаторах, суперконденсаторах, сенсорах)

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Виктор Н., Королев Д. В., Галагудза М. М., Постнов Д. В. Наносенсоры в биологии и медицине: принципы работы и перспективы применения. Биотехносфера, 2013, Т. 26б № 2.

2. Лозовик Ю. Е., Попов А. М. Образование и рост углеродных наноструктур — фуллеренов, наночастиц, нанотрубок и конусов. Успехи физических наук (УФН), 1997, т. 167, с. 751–774.

3. Надда М. З., Петров В. В., Шихабудинов А. М. Исследование свойств нанокомпозитного материала для высокочувствительных сенсоров диоксида азота. Известия высших учебных заведений. Электроника (ИВД), 2012, № 4–2.

Исследование возможности модифицирования углеродной нанотрубки атомом водорода

Гончаров М.В.[1]***, Борознин С.В.***[1]***, Григорьев А.Д.***[1]

e-mail: kesha777388@mail.ru
[1]*Волгоградский государственный университет, Волгоград, Россия*

В работе рассматривалось теоретическое исследование возможности модифицирования углеродной нанотрубки с молекулой водород. В качестве нанотрубки выступала углеродная нанотрубка полупроводниковой нехиральной (6,0) CN типа «зиг-заг», содержащей 50% атомов углерода и 50% атомов азота. Моделирование выполнено с использованием расчетного метода DFT, функционала B3LYP и базисного набора 6-31G. В результате чего был сделан вывод, что проведенное исследование подтвердило возможность модификации углеродной нанотрубки путем присоединения атома водорода.

Наноструктуры на основе углерода уже несколько десятилетий являются одними из самых востребованных материалов нанотехнологий. Благодаря своим уникальным свойствам, они нашли применение в различных областях промышленности, науки и техники. Однако, одним из ключевых вопросов остается получение стабильных наноструктур с заданными свойствами. Одним из наиболее простых способов контроля свойств является функционализация углеродных нанотрубок (УНТ)[1].

Взаимодействие атома водорода с УНТ может происходить по различным механизмам: хемосорбция, физисорбция, интеркаляция [2-3].

В данной работе был смоделирован процесс добавления атома водорода, к азотсодержащей углеродной нанотрубки, ее модель представлена на рисунке 1. (Нанотрубка была кеппирована с двух концов атомами водорода).

Результаты исследования

Был смоделирован процесс взаимодействия модифицированной N-УНТ с атомом водорода (рис. 1).

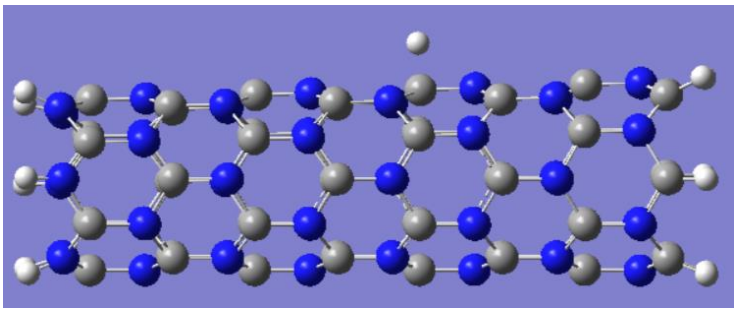


Рис. 1 Модель взаимодействия атома водорода с N-УНТ.

В результате была построена зависимость энергии взаимодействия атома водорода с углеродной нанотрубкой. На графике 1 отчетливо виден один минимум.

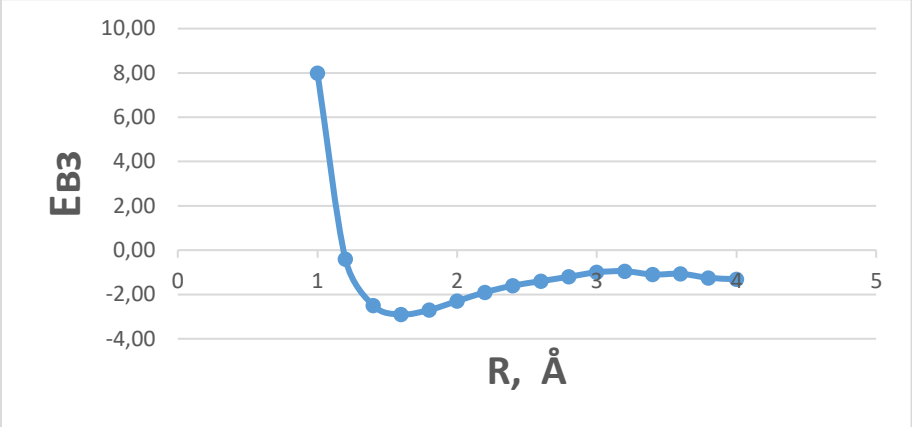


График. 1 Зависимость энергии сорбционного и сенсорного взаимодействия наносистемы N-УНТ с водородом.

Выводы

На основании проведенного компьютерного моделирования было установлено наличие сорбционного и сенсорного взаимодействия между комплексной наносистемой N-УНТ и атомом водорода.

Полученные результаты закладывают научную основу для разработки новых функциональных материалов с заданными характеристиками, что имеет важное значение для развития водородной энергетики, наноэлектроники и сенсорных технологий. Дальнейшие исследования должны быть направлены на оптимизацию условий модифицирования и повышение стабильности функциональных характеристик модифицированных УНТ.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Борознин С. В. Углеродные наноструктуры, содержащие примесные атомы бора: особенности получения, физико-химические свойства и возможности применения. Известия высших учебных заведений. Материалы электронной техники, 2022, т. 25, № 1, с. 64–91.

2. Безносюк С. А., Маслова О. А., Важенин С. В., Жуковский М. С., Жуковская Т. М. Эффекты реконструкции квантово-размерных «трансформеров» в нанотехнологиях «сверху вниз» и «снизу вверх». Известия Алтайского государственного университета, 2007, № 3, с. 18–23.

3. Кулакова И. И., Лисичкин Г. В. Химическое модифицирование графена. Журнал общей химии, 2020, т. 90, № 10, с. 1601–1626.

Исследование адсорбции атомарного кислорода на поверхности углеродной нанотрубки модифицированной азотом

***Мельников А.А.*[1], *Борознин С.В.*[1], *Григорьев А.Д.*[1]**
e-mail: ftrfggbghgf@gmail.ru
[1]*Волгоградский государственный университет, Волгоград, Россия*

В данной работе рассматривалось теоретическое исследование возможности адсорбции атомарного кислорода на поверхности модифицированных углеродосодержащих нанотрубок. Был смоделирован процесс добавления атома кислорода к полупроводниковой нехиральной (6,0) BC нанотрубки типа «зиг-заг», содержащей 50% атомов углерода и 50% атомов азота.

Моделирование выполнено с помощью программ GaussView и Gaussian с использованием расчетного метода DFT, функционала B3LYP и базисного набора 6-31G. Путём компьютерного моделирования были получены параметры взаимодействия между модифицированной нанотрубкой и атомом кислорода, полученные методом DFT. В результате чего был сделан вывод о том, что система углеродная нанотрубка модифицированная азотом – атомарный кислород образует стабильный химический комплекс.

Введение атомов азота в углеродный скелет нанотрубки изменяет её электронную структуру. Азот замещая углерод, улучшает адсорбционные свойства, проводимость нанотрубки, а также повышает химическую активность, что делает такие модифицированные нанотрубки перспективными для использования в электронике, сенсорах и детекторах газов, биологических молекул или загрязняющих веществ [1].

В процессе работы были смоделированы процессы моделирования взаимодействия модифицированной УНТ с атомом кислорода при приближении к атомам углерода и азота в скелете нанотрубки, а также между ними.

Рассмотрим взаимодействие атомарного кислорода с нанотрубкой. Модель этого процесса представлена на рисунке 1.

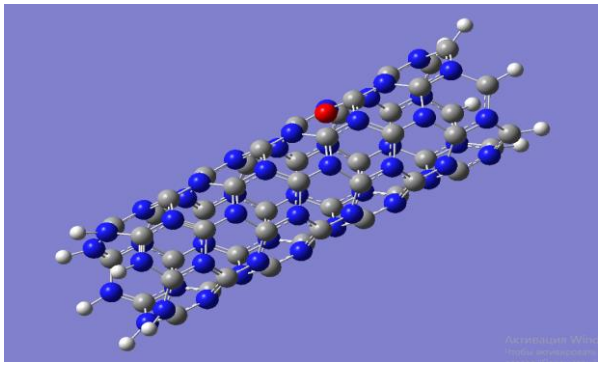


Рис. 1. Модель взаимодействия атомарного кислорода с углеродом нанотрубки.

В результате была построена зависимость энергии взаимодействия атома О с углеродной нанотрубкой. На графике 1 отчетливо виден один минимум.

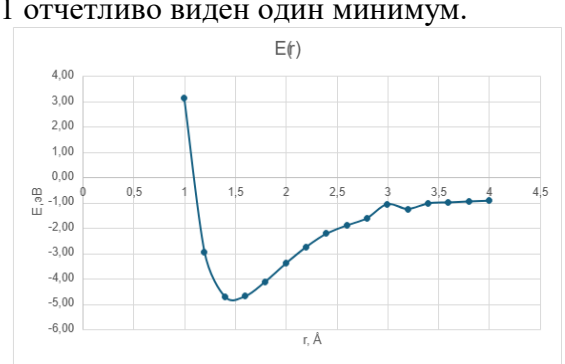


Рис.2. Зависимость энергии взаимодействия наносистемы УНТ с О при приближении к углероду

Был смоделирован процесс сорбции атомарного кислорода и полупроводниковой нехиральной (6,0) ВС нанотрубки типа «зиг-заг», содержащей 50% атомов углерода и 50% атомов.

На основании проведенного компьютерного моделирования было установлено наличие адсорбционного взаимодействия между наносистемой, состоящей из модифицированной азотом углеродной нанотрубки и атомом кислорода.

Можно сделать вывод о том, что углеродная трубка с добавлением атома N в соотношении 50/50 является отличным сорбентом кислорода.

Что позволяет сделать предположение о том, что в будущем легированные азотом нанотрубки могут стать незаменимым материалом для выделения чистого кислорода.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ:

1. Chen Y., Ciuparu D., Haller G. L., Lim S., Pfefferle L. D. Carbon Nanotube Synthesis and Characterization. Carbon, 2006, vol. 44, № 1, p. 67. DOI: 10.1016/j.carbon.2005.11.001.

2. Лозовик Ю. Е., Попов А. М. Образование и рост углеродных наноструктур — фуллеренов, наночастиц, нанотрубок и конусов. Успехи физических наук (УФН), 1997, т. 167, с. 751–774. DOI: 10.3367/UFNr.0167.199707f.0751.

3. Голов А. О., Запороцкова И. В., Запороцков П. А., Борознина Н. П., Борознин С. В., Веревкина К. Ю. Газовые фильтры на основе модифицированных углеродных нанотрубок. NBI-technologies, 2024, № 2.

Исследования влияния вредных газов на комплекс наносистемы и прилежащей к ней карбоксильной группы

***Шабунин А.В.*[1], *Борознин С.В.*[1], *Григорьев А.Д.*[1]**

e-mail: kesha777388@mail.ru
[1]*Волгоградский государственный университет, Волгоград, Россия*

В работе рассматривалось теоретическое исследование возможности применения комплекса азотсодержащих углеродных нанотрубок и карбоксильной группы с атомом фтора. В качестве нанотрубки выступала углеродная нанотрубка полупроводниковой нехиральной (6,0) NC типа «зиг-заг», содержащей 50% атомов углерода и 50% атомов азота. Моделирование выполнено с помощью программ GaussView и Gaussian с использованием расчетного метода DFT, функционала B3LYP и базисного набора 6-31G. Сделан вывод о том, что углеродные нанотрубки образуют с вредными газами стабильные химические комплексы.

Хотя углерод по-прежнему является основным исследуемым материалом для нанотрубок в микроэлектронной технологии, было проведено множество работ по изготовлению нанотрубок, состоящих из других материалов, и такие нанотрубки также демонстрируют уникальные особенности [1].

Среди современных материалов, активно использующихся в области создания сенсорных наноустройств, углеродные нанотрубки занимают лидирующие позиции благодаря своим особым свойствам. Такая область применения обусловлена тем, что они меняют свои электрические и проводящие свойства под воздействием детектируемых атомов и молекул[2].

Ожидается, что УНТ будут потенциально полезны в электронных устройствах в качестве квантовой проволоки, газовой сенсорной промышленности, технологии нанопинцетов, микроскопии, атомно-силовой микроскопии высокого разрешения (АСМ) и автоэмиссионных дисплеев [3].

Многие характерные свойства наноматериалов зависят от их размера, морфологии, покрытия поверхности, расположения карбоксильной группы (-COOH), влияние газовой среды и т.д.

Был смоделирован процесс взаимодействия модифицированной N-УНТ с атомом фтора при приближении к углероду карбоксильной группы, которая в свою очередь была приближена к азоту, входящему в скелет модифицированной углеродной нанотрубки (рис. 1).

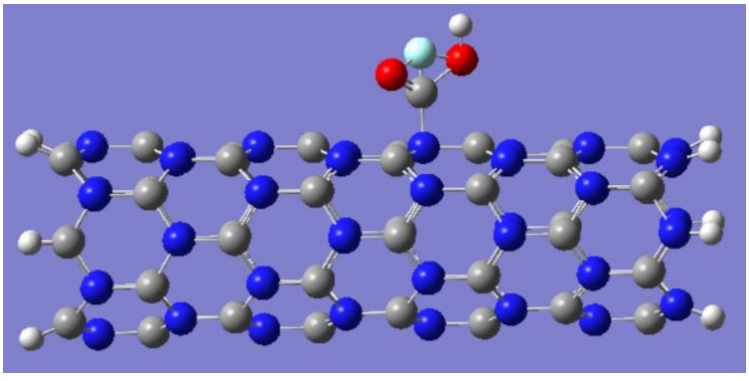


Рис.1. Модель приближения фтора к комплексу.

В результате была построена зависимость энергии взаимодействия атома фтора с комплексом N-УНТ. На графике отчетливо виден один минимум.

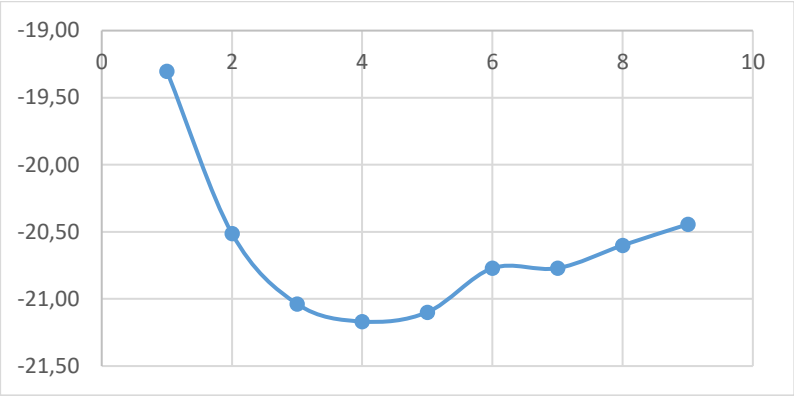


Рис. 2. Зависимость энергии сорбционного и сенсорного взаимодействия комплекса N-УНТ с фтором.

Вывод

На основании проведенного компьютерного моделирования было установлено наличие сорбционного и сенсорного взаимодействия между комплексной наносистемой N-УНТ и фтором.

Исходя из этого, легированные азотом углеродные нанотрубки могут найти применение, как новые высокоэффективные сорбенты вредных газов, что позволяет их использовать в качестве добавки или для создания из них полноценных улавливателей вредных газов как на производствах, так и в бытовых целях.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Голов А. О., Запороцкова И. В., Запороцков П. А., Борознина Н. П., Борознин С. В., Веревкина К. Ю. Газовые фильтры на основе модифицированных углеродных нанотрубок. NBI-technologies, 2024, № 2, с. 45–58.

2. Mahajan S. V., Hasan S. A., Cho J., Shaffer M. S. P., Boccaccini A. R., Dickerson J. H. Carbon Nanotube-Based Conductive Coatings for Flexible Electronics. Nanotechnology, 2008, vol. 19, p. 195301.

3. Zhu Y., Feng Y., Chen S., Ding M., Yao J. High-Performance Supercapacitors Based on Nitrogen-Doped Graphene Aerogels. Journal of Materials Chemistry A, 2020, vol. 8, № 15, pp. 7654–766

Нутационные колебания в ферромагнитных пленках

Мартышкин А.А.[1], ***Садовников А.В.***[1]

e-mail: sadovnikovav@gmail.com
[1]*ФГБОУ ВО «Саратовский национальный исследовательский университет им Н.Г. Чернышевского», Саратов, Россия*

Магноника представляет собой одно из наиболее динамично развивающихся направлений альтернатив CMOS электроники, где в качестве носителей информации выступают спиновые волны (СВ) — коллективные возбуждения магнитной подсистемы в упорядоченных средах. Основное преимущество данного подхода заключается в очень малых длинах волн СВ в гигагерцовом и терагерцовом диапазонах, что позволяет создавать функциональные устройства нанометровых масштабов, совместимых с современными полупроводниковыми технологиями [1,2]. Актуальной задачей изучения динамики прецессии намагниченности остается исследования возможностей расширения рабочего частотного диапазона. Одним из наиболее многообещающих путей решения этой проблемы является переход к использованию нутационных спиновых волн (НСВ) [3-5]. Высокочастотные моды НСВ связаны с инерционными эффектами и кратковременными отклонениями магнитного момента от прецессионной траектории, что открывает доступ к новым динамическим степеням свободы и позволяет кодировать информацию через инерционные характеристики спина.

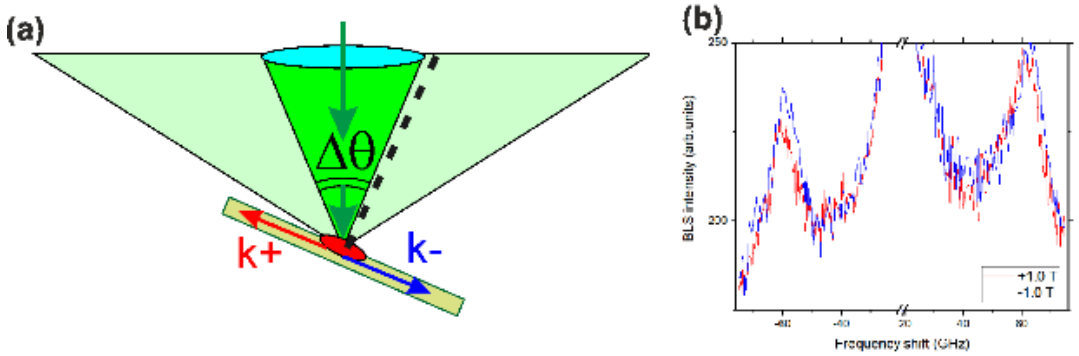


Рис. 1. Типичная схема исследования магнонов методом бриллюэновскойспектроскопии (a). Пример спектров неупругого рассеяния света при комнатной температуре на ферримагнитной пленки CoGd (b).

В данной работе объектами исследования выступали микроструктурированные ферримагнитные пленки состава CoGd, обладающие выраженными инерционными свойствами магнитной подсистемы. В ходе экспериментов использовалась геометрия касательного подмагничивания, обеспечивающая условия для распространения поверхностных и объемных спиновых волн. С помощью метода бриллюэновской светорассеивающей спектроскопии (BLS) с высоким пространственным и частотным разрешением были получены карты интенсивности неупругого рассеяния света при комнатной температуре. Ключевым результатом стало экспериментальное обнаружение безщелевой моды спиновых волн — моды Гольдстоуна. Ее возникновение в исследуемых структурах CoGd обусловлено спонтанным нарушением симметрии при фазовом переходе, что характерно для систем с конкурирующими взаимодействиями. Помимо этого, в спектрах были идентифицированы высокочастотные пики, соответствующие нутационной динамике. Авторами была проведена визуализация формирования и распространения пространственно-локализованных пакетов нутационных мод. Установлено, что данные пакеты сохраняют

когерентность на субмикронных масштабах, что открывает путь к их использованию в качестве динамических носителей информации в гибридных магнонных устройствах.

Проведенное исследование экспериментально подтверждает принципиальную возможность управления инерционной динамикой спина в ферромагнитных структурах. Обнаружение нутационных мод и моды Гольдстоуна закладывает физическую основу для создания качественно новых высокоскоростных магнонных цепей. Работа демонстрирует, что задействование нутационных степеней свободы позволяет значительно повысить информационную емкость и энергоэффективность гибридных магнитоэлектронных платформ.

Финансирование: работа выполнена в рамках гранта Российского научного фонда.(тема “№ 23-79-30027”).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Sadovnikov A. V. et al. Exceptional‑point phase transition in coupled magnonic waveguides. Physical Review Applied, 2022, vol. 18, № 2, pp. 024073.

2. Martyshkin A. A. et al. Magnonic interconnections: Spin‑wave propagation across two‑dimensional and three‑dimensional junctions between yttrium iron garnet magnonic stripes. Physical Review Applied, 2022, vol. 18, № 6, pp. 064093.

3. Nikitov S. A. et al. Dielectric magnonics — from gigahertz to terahertz. Uspekhi Fizicheskikh Nauk, 2020, vol. 190, № 10, pp. 1009–1040.

4. Neeraj K. et al. Inertial spin dynamics in ferromagnets. Nature Physics, 2021, vol. 17, № 2, pp. 245–250.

5. Wegrowe J. E. et al. Magnetization dynamics, gyromagnetic relation, and inertial effects. American Journal of Physics, 2012, vol. 80, № 7, pp. 607–611

Нелинейный отклик графена на электромагнитную волну в модели сильной связи

Давидович М.В.[1]

e-mail: davidovichmv@info.sgu.ru
[1]*Институт физики, Саратовский национальный исследовательский государственный университет имени Н.Г. Чернышевского, Саратов, Россия*

Зонная структура графена впервые получена в приближении сильной связи в [1], и в общем случае имеет вид двух смыкающихся подзон $\pi^{\pm}$ в виде [1–3] $\mathrm{E}^{\pm}(\mathbf{q})=\left(\varepsilon_{2p}\pm\gamma_0 w(\mathbf{q})\right)/(1\mp\gamma_1 w)\approx\pm\gamma_0 w(\mathbf{q})+\gamma_1\gamma_0 w^2(\mathbf{q})+\varepsilon_{2p}$. Здесь $2.5\le\gamma_0\le 3$ (эВ) существенно больше интеграла перекрытия $\gamma_1<0.1$ эВ, $\varepsilon_{2p}\approx 0$, $\mathbf{q}=\mathbf{p}/\hbar$, $\mathbf{p}$. Также обозначаем $w(\mathbf{p})=w(p_x,p_y)$. При $\gamma_1=0$, получаем симметричную структуру зоны Бриллюэна (BZ): $w(\mathbf{q})=\sqrt{1+4\cos\left(q_x a\sqrt{3}/2\right)\cos\left(q_y a/2\right)+4\cos^2\left(q_y a/2\right)}$. Здесь $a=0.246$ нм – постоянная решетки графена. Берем $\gamma_0=3$ эВ, т.е. $v_F=\sqrt{3}\gamma_0 a/(2\hbar)=0.9739\cdot 10^6$ м/с. Графен – сильно нелинейный материал. Его нелинейные свойства исследованы теоретически в большом числе работ (например, [4–7]) и экспериментально, в частности, в [8]. Используем дисперсионное уравнении $\mathrm{E}^{\pm}(\mathbf{q})=\pm\gamma_0 w(\mathbf{q})$. Вводим малую энергетическую щель $\varepsilon=\gamma_0\delta$, добавляя δ^2 под корень в $w(\mathbf{q})$. В случае отсутствия электромагнитного поля оператор поверхностной плотности тока в графене имеет вид $j_\alpha=-e\langle\tilde{\psi}^{+}|v_\alpha|\tilde{\psi}\rangle$, где $\alpha=x,y$, $v_\alpha=\partial\mathrm{E}/\partial p_\alpha=(\gamma_0/\hbar)\partial w(\mathbf{q})/\partial q_\alpha$ – компонента скорости. В тепловом поле следует решать задачу о матрице плотности, удовлетворяющей уравнению Неймана. Диагональные ее элементы $f^{\pm}$ суть функции распределения (ФР) в зонах $\pi^{\pm}$. В отсутствии поля это функции Ферми-Дирака $f^{\pm}=f_0^{\pm}=\left[1+\exp\left(\pm(\gamma_0 w(\mathbf{q})-\mu_c)/(k_B T)\right)\right]^{-1}$, где μ_c - химический потенциал.

При действии поля имеем вектор-потенциалом $\mathbf{A}=\mathbf{x}_0 A_x=\mathbf{x}_0 cE_0\sin(\omega_0 t)/(\omega_0\eta_0)$ и изменение импульса квазичастиц. При этом ФР изменяется. Находим ее из кинетического уравнения Больцмана в приближении Бхатнагара-Гросса-Крука (БГК), считая процесс почти монохроматическим. Введенному вектор-потенциалу соответствует волна с электрическим полем $E_x=E_0\cos(\omega_0 t)$ и магнитным полем $H_y=(E_0/\eta_0)\cos(\omega_0 t)$. Считаем, что в момент t=0 волна с полем $E_x=E_0\chi(t-z/c)\cos(\omega_0(t-z/c))$ подошла к графену (в плоскости z=0) и действует бесконечно долго, $\chi(t-z/c)$ – функция Хевисайда. Считаем время t большим. Поле действует на электроны в зоне проводимости графена, изменяя их импульс. В этом случае можно записать $j_\alpha(t)=j_\alpha^{+}(t)+j_\alpha^{-}(t)$, где

$$j_\alpha^{\pm}(t)=\frac{-2e}{(2\pi)^2}\int_{BZ} v_\alpha^{\pm}(t,\mathbf{q})f^{\pm}(t,\mathbf{q})d^2q-\frac{2e^2\eta_0}{(2\pi)^2 c}\int_{BZ}\left[m_{\alpha\beta}^{\pm}(t,\mathbf{q})\right]^{-1}A_\beta(t)f^{\pm}(t,\mathbf{q})d^2q. \qquad (1)$$

Здесь $v_\alpha^{\pm}(\mathbf{q})=\pm(\gamma_0/\hbar)\partial_{q_\alpha}w(\mathbf{q})$ – компонента скорости, $\left[m_{\alpha\beta}^{\pm}(\mathbf{q})\right]^{-1}=\pm(\gamma_0/\hbar^2)\partial_{q_\alpha}\partial_{q_\beta}w(\mathbf{q})$, $m_{\alpha\beta}$ – тензор массы, $\alpha,\beta=x,y$. Для электронов ФР $f_e(t,\mathbf{q})=f^{+}(t,\mathbf{q})$, для дырок $f_h(t,\mathbf{q})=f^{-}(t,\mathbf{q})=1-f^{+}(t,\mathbf{q})$, $f^{\pm}(t,\mathbf{q})=\left[1+\exp\left(\pm(\gamma_0 w(t,\mathbf{q})-\mu_c)\right)\right]^{-1}$. В (1) учтено $g_s=2$ – вырождение по спину, $(t,\mathbf{q})$ означает зависимость $\mathbf{q}$ от времени в случае квазимонохроматического импульса. Далее при большом времени воздействия мы переходим к спектральным зависимостям $\exp(i\omega_0 t)$. В нашем случае в (1) входит компонента эффективной массы, а также компонента скорости (при рассмотренной поляризации важна

только $v_x^{\pm}$). Они изменяются подт действием вектор-потенциала: $q_x \to q_x - q_0(t)$, $q_0(t) = e\eta_0 A_x(t)/(\hbar c)$. В результате получаем функции времени. Такой же функцией времени становится зонная структура (1), в которой $w(t,\mathbf{q}) = w(q_x - q_0(t), q_y)$. Используем разложения по параметру q_0.

Пусть возбуждение действует очень долго. Используя метод возмущенмий, и поле $E_x(\omega) = -i\omega\eta_0 A_x(\omega)/c$, разлагаем ток (1) по нечетным гармоникам. В полном поле следует учесть самодействие графена, т.е. генерацию волн плотностью его тока. В общем случае это приводит к необходимости решения нелинейных уравнений. В приближении падающего поля получаем, используя разложенгия скорости и функции распределения, коэффициент генерации третьей гармоники

$$\kappa_{13} = \frac{e^2 E_0^2 a^2}{(\hbar\omega_0)^2}\frac{I_3}{I_1}. \tag{2}$$

$$I_1 = \frac{1}{a}\int_{BZ}\left(\pm v_0(\mathbf{q}) f_1^{\pm}(\mathbf{q}) + v_1(\mathbf{q}) f_0^{\pm}(\mathbf{q})\right) d^2q, \tag{3}$$

$$I_3 = \frac{1}{a^3}\int_{BZ}\left(\pm v_0(\mathbf{q}) f_3^{\pm}(\mathbf{q}) \pm v_3(\mathbf{q}) f_0^{\pm}(\mathbf{q}) \pm v_1(\mathbf{q}) f_2^{\pm}(\mathbf{q}) \pm v_2(\mathbf{q}) f_1^{\pm}(\mathbf{q})\right) d^2q \ . \tag{4}$$

В результате интегрирования в (3), (4) рпо полной ЗБ коэффициент (2) в зависимости от изменения μ_c от 0.01 до 2 изменяется от 10^{-3} до 10^{-5}, что хорошо соответствует эксперименту из [8].

Финансирование: Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства образования и науки РФ в рамках государственного задания (№ FSRR-2026-0006).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Wallace P.R. The Band Theory of Graphite. Phys. Rev., 1947, vol. 71, P. 622–634.

2. Reich S., Maultzsch J., Thomsen C. Tight-binding description of graphene. Phys. Rev. B, 2002, vol. 669, P. 035412.

3. Castro Neto A. H., Guinea F., Peres N.M.R., Novoselov K.S., Geim A.K. The electronic properties of graphene. Rev. Mod. Phys., 2009, vol. 81, P. 109–162.

4. Mikhailov S.A. Non-linear electromagnetic response of graphene. Europhys. Lett., 2007, vol. 79, P. 27002.

5. Lewkowicz M., Rosenstein B. Dynamics of Particle-Hole Pair Creation in Graphene. Phys. Rev. Lett., 2009, vol. 102, P. 106802.

6. Dora B., Moessner R. Nonlinear electric transport in graphene: Quantum quench dynamics and the Schwinger mechanism. Phys. Rev. B, 2010, vol. 81, P. 165431.

7. Vandecasteele N., Barreiro A., Lazzeri M., Bachtold A., Mauri F. Current-voltage characteristics of graphene devices: Interplay between Zener-Klein tunneling and defects. Phys. Rev. B, 2010, vol. 82, P. 045416.

8. Hafez H.A., Kovalev S., Deinert J-Ch., Mics Z., Green B., Awari N., Chen M., Germanskiy S., Lehnert U., Teichert J., Wang Z., Tielrooij K-J., Liu Z., Chen Z., Narita A., Müllen K., Bonn M., Gensch M., Turchinovich D. Extremely efficient terahertz high-harmonic generation in graphene by hot Dirac fermions. Nature, 2018, vol. 561, P. 507–511.

Полюсной модели атома 20 лет, этапы ее развития.

Стрекалов С.Д.[1]

e-mail: strekalov_sergey@mail.ru
[1]Волгоградский государственный технический университет. Волгоград, Россия

Для человека 20 лет - это возраст, которому соответствуют определенные навыки: умение ходить, читать, писать, решать определенный спектр задач. Для некоторых - это создание семьи, появление первых детей, выбор жизненного пути, профессии, начало познания мира.

Что такое двадцать лет для полюсной модели атома? Сегодня мы попробуем подвести некоторые итоги. Что можно считать датой рождения? Скорее всего это не рождение идеи как таковой, а первая публикация по данной тематике. Первый раз модель публично была представлена в ФГБУН Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе Российской академии наук (Ioffe Institute) в 2006 году. Вторая публикация полюсной модели атома вышла в Москве в издательстве МГУ в 2007 году. Что касается научной среды г. Волгограда, то здесь необходимо отметить особую заслугу Запороцковой И.В. - именно на семинаре 2009 года, организованном кафедрой Судебной экспертизы и физического материаловедения впервые был заслушан доклад "Полюсное строение атома".

Далее В 2011 году в Волгу вышла монография «Физическая химия: полюсные модели элементов и систем». Рецензентом первого издания был Лауреат государственной премии СССР Пындак В.И. Она включа следующие главы:

1. Полюсная модель строения атома;
2. Полюсное представление моделей атомов и молекул;
3. Полюсная система химических элементов;
4. Полюсный наноконструктор.

Во второе издание были включены следующие главы:

1. Физические аспекты полюсных структур;
2. Полюсные модели возможных форм углерода.

На данный момент готовится к выпуску третье издание, куда планируется поместить материалы:

1. Объяснение явления катализа с использованием полюсных систем;
2. Аккумулирование водорода в железотитановых спловах;
3. Полюсные модели каучука и гудатерча;
4. Полюсные модели основных элементов биологических систем;
5. Изменение полюсной конфигурации хлоридов натрия в зависимости от давления;
6. Полюсные модели химических элементов дополнится элементами (Нъютоний и Короний).

Также будут включены материалы, расширяющие понятие полюсности до макрообъектов.

Помимо работы над монографией, продолжается публикация работ по полюсным моделям в изданиях различного уровня. Одной из них является конференция, организованная химическим обществом Д.И.Менделеева в которой будут опубликованы материалы, посвященные литий ионным аккумуляторы и результаты работ по аккумулированию водорода с использованием соединений титана с железом.

За двадцать лет существования полюсной модели в литературе отсутствует критика данной модели. Это можно обьяснить как согласием с этой моделью, так и недостаточной информированностью научной общественности о ее существовании. На данный момент появляются первые сторонники данной идеи, которые пытаются использовать полюсную модель для объяснения своих результатов. Совместно с учеными института ядерной энергии

и промышленности проводятся работы по использованию полюсных систем при анализе распада радиоактивного изотопа калия (^{40}К) и других радиоактивных атомов.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ.

1. Стрекалов С. Д. Нанопринципы создания волновой техники. Москва: Изд-во МГУ, 2007. С. 11.

2. Стрекалов С. Д. Полюсное строение атома // Нанотехнологии и наноматериалы: современное состояние и перспективы развития в условиях Волгоградской области: материалы II Всерос. науч.-техн. конф. Волгоград: Изд-во ВолГУ, 2009. С. 460–470.

3. Стрекалов С. Д. Физическая химия: полюсные модели элементов и систем. — Волгоград: Изд-во ВогГУ, 2011. 110 с.

4. Стрекалов С. Д., Фролова М. А. Полюсный наноконструктор на примере углерода. Перспективные технологии и материалы: материалы науч.-практ. конф. с междунар. участием. Севастополь, 2020. С. 137–140.

5. Стрекалов С. Д., Горлов И. Ф. Полюсные модели химических элементов как инструмент прогнозирования свойств лактозы и молочных продуктов // Устойчивое технологическое развитие аграрно-пищевых систем — гарантия продовольственной безопасности : сб. материалов Междунар. науч.-практ. конф. Москва, 2025. С. 355–358.

Нанотехнологии и наноматериалы: современное состояние и перспективы развития [Текст] : сб. тезисов VI Междунар. науч.-техн. конф., г. Волгоград, 28–30 апр. 2026 г. / Федер. гос. авт. образоват. учреждение высш. образования «Волгогр. гос. ун-т» ; орг. ком. конф. И.В. Запороцкова [и др.]. – Волгоград : Изд-во ВолГУ, 2026. – 192 с.

Н25

ISBN

Аннотация

УДК 620.3
ББК 30.3

Научное издание

НАНОТЕХНОЛОГИИ И НАНОМАТЕРИАЛЫ: СОВРЕМЕННОЕ СОСТОЯНИЕ И ПЕРСПЕКТИВЫ РАЗВИТИЯ

СБОРНИК ТЕЗИСОВ VI МЕЖДУНАРОДНОЙ НАУЧНО-ТЕХНИЧЕСКОЙ КОНФЕРЕНЦИЯ

г. Волгоград 28–30 апреля 2026 года

Главный редактор *Н.В. Горева*
Техническое редактирование *О.Н. Ядыкиной*
Оформление обложки *Н.Н. Захаровой*

Печатается в авторской редакции.

Подписано в печать . 2026 г. Формат 60×84/16.
Бумага офсетная. Гарнитура Таймс. Усл. печ. л. ,.
Уч.-изд. л. ,. Тираж экз. Заказ . «С» .

Волгоградский государственный университет.
400062 Волгоград, просп. Университетский, 100.
www.volsu.ru

Отпечатано в издательстве Волгоградского государственного университета.
400062 Волгоград, ул. Богданова, 32.
E-mail: izvolgu@volsu.ru