

БАЛТИЙСКИЙ ФЕДЕРАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ им. ИММАНУИЛА КАНТА

ПОЛУЧЕНИЕ И ПРИМЕНЕНИЕ
МЕЗО- И НАНОСТРУКТУРИРОВАННЫХ ФУНКЦИОНАЛЬНЫХ
УГЛЕРОДНЫХ МАТЕРИАЛОВ

Выпуск 1

Материалы Первой Балтийской школы по наноуглеродным
материалам (ПБШ «НУМ-2025»)
7—12 ноября 2025 года
Калининград

*Под редакцией доктора физико-математических наук
Ю. П. Свирко*

Научное электронное издание

Калининград
Издательство Балтийского федерального университета им. И. Канта
2026

© Оформление, БФУ им. И. Канта, 2026
ISBN 978-5-9971-1039-0

Рецензенты

Ю. П. Свирко, д-р физ.-мат. наук, гл. науч. сотр.,
Балтийский федеральный университет им. И. Канта;
В. В. Савин, д-р физ.-мат. наук, проф.,
Балтийский федеральный университет им. И. Канта;
Г. С. Куприянова, д-р физ.-мат. наук,
Балтийский федеральный университет им. И. Канта;
А. Н. Образцов, д-р физ.-мат. наук, проф.,
Московский государственный университет имени М. В. Ломоносова;
В. И. Клещ, д-р физ.-мат. наук, ведущ. науч. сотр.,
Московский государственный университет имени М. В. Ломоносова;
Р. Б. Моргунов, д-р физ.-мат. наук, проф., ведущ. науч. сотр.,
Федеральный исследовательский центр проблем химической физики
и медицинской химии РАН

Получение и применения мезо- и наноструктурированных функциональных углеродных материалов. Выпуск 1 : материалы Первой Балтийской школы по наноуглеродным материалам (ПБШ «НУМ-2025») / под ред. Ю. П. Свирко [Электронный ресурс] : научное электронное издание. — Калининград : Издательство БФУ им. И. Канта, 2026. — <https://publish.kantiana.ru/catalog/non-periodical/sborniki-trudov-konferentsiy/poluchenie-i-primeneniya-mezo-i-nanostrukturirovannykh-funktsionalnykh-uglerodnykh-materialov-vypusk/>

Представлены материалы Первой Балтийской школы по наноуглеродным материалам (ПБШ «НУМ-2025» «Получение и применения мезо- и наноструктурированных функциональных углеродных материалов»), в которых отражены результаты теоретических и прикладных исследований специалистов, молодых ученых, аспирантов, студентов и соискателей, принявших участие в научном мероприятии.

Предназначено для научных работников, аспирантов, магистрантов и студентов физико-химических специальностей.

СОДЕРЖАНИЕ

<i>Бауетдинов Ю. А.</i> Структурные и энергетические характеристики алмазов, образованных из новых аллотропов графена: результаты компьютерного моделирования.....	6
<i>Бахметьев М. В., Моргунов Р. Б.</i> Температурные вариации намагниченности нанокарбида молибдена.....	8
<i>Беленков М. Е., Чернов В. М., Грешняков В. А.</i> Структура новых слоев графена и фторографена 4-6-9.....	10
<i>Бирюков С. И., Покровская А. Р., Матвеева А. Г., Богданова А. С., Томская А. Е., Клинов Д. В.</i> Стабилизация суспензий углеродных нанотрубок белками для биомедицинских применений.....	12
<i>Ван Е. Ю.</i> Ресурсосберегающие технологии при производстве и утилизации электрохимических источников тока.....	14
<i>Васенькина Е. Л., Масютин Я. А.</i> Получение и применение наноуглеродных материалов при изготовлении литий-ионных аккумуляторов и постлитиевых электрохимических источников тока.....	16
<i>Ворфоломеева А. А., Федосеева Ю. В., Окотруб А. В., Булушева Л. Г.</i> Влияние кислотной обработки однослойных углеродных нанотрубок на их взаимодействие с фосфором и электрохимические характеристики в литий-ионных аккумуляторах.....	18
<i>Вотьяков С. А., Осадчий А. В.</i> Система объемно-локализованных электронных состояний в положительно заряженных полупроводниковых одностенных углеродных нанотрубках.....	20
<i>Грешняков В. А.</i> Теоретический поиск новых алмазоподобных соединений.....	22
<i>Ездин Б. С., Пахаруков Ю. В., Васильев С. А., Сафаргалиев Р. Ф., Шабиев Ф. К.</i> Анодный материал на основе кремний-углеродных наночастиц «ядро-оболочка».....	24
<i>Загузина А. А., Ворфоломеева А. А., Окотруб А. В., Булушева Л. Г.</i> Гибридные материалы на основе MoS ₂ и rGO для низкотемпературных Li- и Na-ионных аккумуляторов.....	26
<i>Исмагилов Р. Р.</i> Формирование текстурированных алмазных пленок и иглоподобных кристаллитов методом осаждения из газовой фазы.....	28
<i>Кашин С. Н., Дворецкая Е. В., Моргунов Р. Б.</i> Структурно-зависимые магнитные свойства графена на никелевой подложке.....	29
<i>Клабукова А. Г., Бердников Н. А., Баринов И. В., Савин В. В., Савина Л. А.</i> Разработка высокоэффективного анодного материала для Ni-MH аккумуляторов на основе соединения La-Ni с магнитными (Fe-Nd-B) и углеродными (УНТ) функциональными добавками.....	31
<i>Клабукова А. Г., Бердников Н. А., Жеребцов И. С., Савин В. В.</i> Получение аморфных и алмазоподобных наноуглеродных материалов.....	33
<i>Клец В. И.</i> Эмиссия электронов из углеродных наноструктур.....	35

<i>Климова Е. И., Молоканова О. О., Молоканова О. А.</i> Влияние формы высокодисперсных углеродных наноструктур на частотные зависимости электрических характеристик композитов на основе органосилоксанов.....	36
<i>Копп И. А.</i> Электропроводящие композитные волокна с углеродными наноструктурами. Создание технологии и запуск производства.....	38
<i>Кострина А. А., Цибулькинова А. В., Лятун И. И., Брюханов В. В., Самусев И. Г.</i> Плазменные свойства и аномальная дисперсия в оптических спектрах пористой лазерно-структурированной поверхности анодированного титана.....	40
<i>Кузнецов В. Л.</i> Коммерческие многостенные углеродные нанотрубки: сравнительное исследование	42
<i>Кулакова Е. А.</i> Изучение особенностей формирования свиткообразных углеродных наноструктур в рамках молекулярно-механического моделирования	45
<i>Куницына Е. И., Моргунов Р. Б.</i> Структурные и магнитные особенности углеродных нанотрубок, синтезированных каталитическим методом.....	47
<i>Куприянова Г. С., Мершиев И. Г.</i> ¹³ C ЯМР как метод изучения структуры углеродных материалов	49
<i>Куракин В. А., Коберник Т. Н.</i> Топология и электротранспортные характеристики углеродных полипризманов	51
<i>Малютенко Г. А., Шабиев Ф. К., Пахаруков Ю. В., Шабиева А. В., Сафаргалиев Р. Ф.</i> Плоские тепловые волны на границе раздела «графеносодержащая наножидкость — углеводород»	53
<i>Молоканова О. А.</i> Материаловедческие основы создания электропроводящих композитных волокон с углеродными наноструктурами.....	55
<i>Моргунов Р. Б.</i> Магнитные свойства графена и графеноподобных 2D-материалов	57
<i>Образцов А. Н.</i> Общие принципы и практические методы получения углеродных пленок плазмо-химическим осаждением	59
<i>Образцова Е. А., Матвеева А. Г., Богданова А. С., Покровская А. Р., Бирюков С. И., Томская А. Е., Клинов Д. В.</i> Биосовместимые композиты с углеродными нанотрубками	60
<i>Павлик В. В.</i> Структура и свойства автоинтеркалированных соединений на основе графиновых слоев.....	62
<i>Погосян Э. К., Стасюк И. О.</i> Комплексные методы повышения энергетической эффективности и эксплуатационного ресурса лопастных насосных установок	64
<i>Рахвалов С. А., Шабиев Ф. К., Пахаруков Ю. В., Шабиева А. В., Сафаргалиев Р. Ф.</i> Теплопроводящие свойства наноструктурированной пленки на основе графена и молекул углеводородов	66
<i>Сабуров А. М., Грешняков В. А.</i> Структура нанокристаллов из связанных зигзагообразных углеродных нанотрубок.....	68
<i>Саламатов В. Г., Федотов В. В.</i> Самораспространяющийся высокотемпературный синтез (СВС): разработка автономных источников тока и высокоэнергетического излучения	70
<i>Саляхова Д. Д., Мавринский В. В.</i> Гибридные sp-sp ² слоевые соединения, сформированные на основе графена L ₄₋₆₋₈	72

<i>Самборский Ф. М., Грешняков В. А.</i> Трехмерно полимеризованный фуллерит C ₆₀ низкой плотности	74
<i>Смирнов М. Л.</i> Изучение влияния наночастиц золота на коэффициент диффузии аминокислоты L-триптофана в водном растворе методом диффузионно-упорядоченной ЯМР-спектроскопии	76
<i>Соковнин А. Д., Грешняков В. А.</i> Расчет структуры графеновых лент на основе полиазулена и полипенталена	78
<i>Трунин А. С.</i> Локализованные рациональные решения (1+2) нелинейного уравнения Клейна — Гордона	80
<i>Тулупов И. В., Исаев А. Ю., Шабиев Ф. К., Галунин Е. В., Шигабаева Г. Н.</i> Исследование сорбции ионов Pb ²⁺ из водных сред на оригинальных и функционализированных углеродных нанотрубках «Таунит-М»	81
<i>Тюрин А.</i> Синтез и исследование катализаторов метанирования CO ₂ на основе никеля и углеродных нанотрубок	83
<i>Федосеева Ю. В., Лисица Е. В., Ворфоломеева А. А., Панфилова А. Д., Булушева Л. Г., Окотруб А. В.</i> Синтез и химическая модификация мезопористых углеродных материалов для применения в качестве электродов аккумуляторов и конденсаторов	84
<i>Федосеева Ю. В., Городецкий Д. В., Булушева Л. Г., Окотруб А. В., Седельникова О. В.</i> Влияние поверхностных состояний датчика из алмазной пленки и графитовых электродов на его фотоотклик на рентгеновское излучение	86
<i>Чупахин Е. Г., Масютин Я. А., Шевелюхина А. В., Капитанова Т. К., Кулигина Т. О., Ларина В. В.</i> Углеродные материалы для анодов: от графита до метаматериалов	88
<i>Шабиев Ф. К., Пахаруков Ю. В., Васильев С. А., Ездин Б. С., Сафаргалиев Р. Ф.</i> Самоорганизация наночастиц углерода как процесс управляемого роста наноструктурированных материалов	90
<i>Шабиева А. В., Пахаруков Ю. В., Сафаргалиев Р. Ф., Шабиев Ф. К.</i> Гофрированные поверхности для создания упорядоченных подложек с целью сепарации бактерий разного размера	92
<i>Шевелюхина А. В., Капитанова Т. К., Кулигина Т. О., Ларина В. В.</i> Влияние различных катализаторов на карбонизацию целлюлозы	94
<i>Шульгин А. В., Молоканова О. О., Молоканова О. А.</i> Прогнозирование степени фильерной вытяжки волоконных композитов с углеродными нанотрубками	96
<i>Яковлев А. С., Катин К. П.</i> Двумерные литиевые материалы для хранения водорода: моделирование из первых принципов	98

Ю. А. Бауетдинов

*Национальный исследовательский ядерный университет МИФИ, Москва, Россия
yabauetdinov@gmail.com*

Структурные и энергетические характеристики аллотропов графена, образованных из новых аллотропов графена: результаты компьютерного моделирования

Двумерные углеродные материалы на основе графена остаются в центре внимания современной наноэлектроники и фотоники. Одним из наиболее перспективных направлений является исследование аллотропов графена — тонких слоев с sp^3 -гибридизацией, получаемых из графена за счет межслойных ковалентных связей [1]. Синтез аллотропов графена открывает возможность создания материалов с широкими запрещенными зонами и высокой жесткостью при сохранении нанометровой толщины. Однако устойчивость таких структур, особенно на основе новых аллотропов графена (бифенилен, graphyne, DHQ-graphene и др.), остается недостаточно изученной, что и определяет актуальность проведенной научной работы.

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

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

Получено восемь моделей аллотропов графена, три из которых (на основе pristine-graphene, squaragraphene и 6,6,12-graphyne) продемонстрировали термическую устойчивость до 500 К. Энергетические барьеры распада составили 2,8—5,4 эВ, что сопоставимо с прототипом аллотропа графена. Рассчитанные ширины запрещенных зон лежат в пределах 1,5—4,2 эВ (по HSE), модули Юнга —

247—499 Н/м, коэффициенты Пуассона — 0,02—0,55. Оптический анализ показал выраженную активность в видимом диапазоне, что открывает перспективы применения в оптоэлектронике и датчиках.

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

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

Список литературы

1. *Chernozatonskii L. A., Mavrin B. V., Sorokin P. B.* Determination of ultrathin diamond films by Raman spectroscopy // *Jatp Letters*. 2009. Vol. 134. P. 90. doi: 10.1002/pssb.2011 47478.

2. *Katin K. P., Podlivaev A. I., Kochaev A. I. et al.* Diamanes from novel graphene allotropes: Computational study on structures, stabilities and properties // *FlatChem*. 2024. Vol. 44. P. 100622. doi: 10.1016/j.flatc.2024.100622. EDN: ABWOGA.

М. В. Бахметьев¹, Р. Б. Моргунов²

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

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

¹ maxbaha4@gmail.com, SPIN-код: 6276-5440

² ORCID 0000-0002-4859-2733, SPIN-код: 9834-3340

Температурные вариации намагниченности нанокарбида молибдена

Нанокарбид молибдена в различных фазах является сверхпроводником второго рода [1]. Размер и структура наночастиц Mo_2C зависят от условий пиролиза. Частицы размером < 5 нм образуются в фазе $\alpha\text{-Mo}_2\text{C}$, а более крупные частицы диаметром > 50 нм — в фазе $\beta\text{-Mo}_2\text{C}$ при температуре 850°C [1]. Эти две фазы обладают сверхпроводимостью с критической температурой T_C в интервале 6,7—7,3 К и 8,1—12,2 К соответственно. Возможность синтеза наночастиц Mo_2C этих фаз из матричной системы на основе карбораниленсилоксана, полученного из Мо, делает их идеальной системой для исследования размерных эффектов, влияющих на соответствующие сверхпроводящие свойства двух фаз. В данной работе исследовался нанокарбид молибдена с размерами наночастиц ~ 800 нм.

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

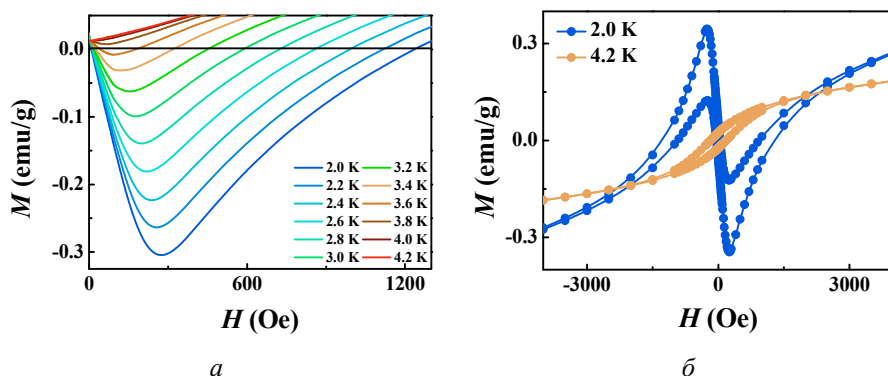


Рис. Температурные зависимости намагниченности в интервале $T=2$ —4,2 К (а);
петли гистерезиса при $T=2$ К и 4,2 К (б)

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

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

Список литературы

1. *Kotel-Veetil M. K., Qadri S. B., Osofsky M. et al.* Size-Induced Effects on the Superconducting Properties of Mo_2C Nanoparticles // *J. Phys. Chem. C.* 2007. Vol. 111. P. 16878.
2. *Geng D., Zhao X., Chen Z. et al.* Direct Synthesis of Large-Area 2D Mo_2C on In Situ Grown Graphene // *Adv. Mater.* 2017. Vol. 29. P. 1700072.

М. Е. Беленков

Челябинский государственный университет, Челябинск, Россия
me.belenkov@gmail.com, SPIN-код: 2176-6937

В. М. Чернов

Челябинский государственный университет, Челябинск, Россия
SPIN-код: 9951-7656

В. А. Грешняков

Челябинский государственный университет, Челябинск, Россия
Балтийский федеральный университет им. И. Канта, Калининград, Россия
ORCID: 0000-0002-2686-374X, SPIN-код: 2627-5388

Структура новых слоев графена и фторографена 4-6-9

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

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

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

По результатам модельных расчетов, графен L_{4-6-9} является проводником, а фторографен $F-L_{4-6-9}$ обладает шириной запрещенной зоны 3,04 эВ. Энергия сублимации фторографенового слоя составляет $\sim 14,0$ эВ/CF. Это значение сопоставимо со значениями энергий сублимации фторографеновых слоев $F-L_6$, $F-L_{4-8}$, $F-L_{3-12}$, $F-L_{4-6-12}$, $F-L_{5-7}$ [2] и достаточно велико, что может свидетельствовать о возможности существования исследуемого слоя при нормальных условиях. Рассмотренные в настоящей работе слои графена и фторографена могут найти применение в нанoeлектронике.

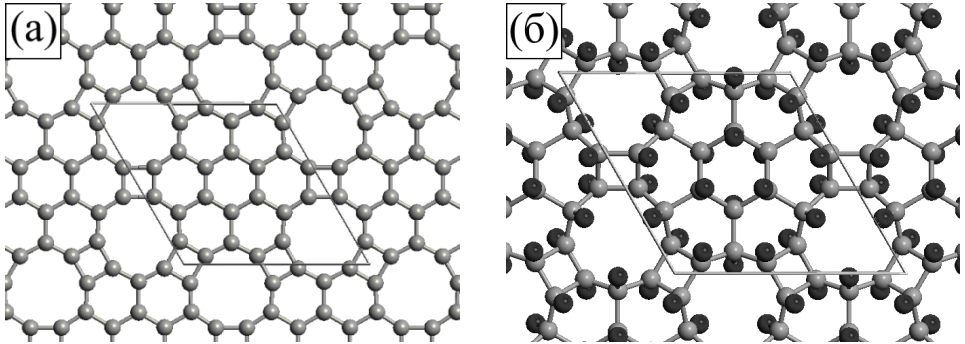


Рис. Слой и элементарная ячейка:
 a — графена L_{4-6-9} ; b — фторографена $F-L_{4-6-9}$
(серым цветом обозначены атомы углерода, черным — фтора)

Список литературы

1. Беленков *E. A.*, Грешняков *B. A.* Теоретическое исследование фазового превращения тетрагонального графена L_{4-8} в полиморфную разновидность алмаза $LA7$ // Вестник ЮУрГУ. Сер.: Математика. Механика. Физика. 2017. Т. 9 (3). С. 51—57.
2. *Belenkov M. E.*, *Butakov A. V.*, *Chernov V. M.* Structure and electronic properties of 3—12 fluorographene crystals // Chelyabinsk Physical and Mathematical Journal. 2024. Vol. 9 (3). P. 514—522.

С. И. Бирюков

*МФТИ, Физтех, 141700, Долгопрудный, Московская область;
Балтийский федеральный университет им. И. Канта, Калининград, Россия
biriukov.si@mipt.ru*

А. Р. Покровская

*МФТИ, Физтех, 141700, Долгопрудный, Московская область
SPIN-код: 6083-6550*

А. Г. Матвеева

*МФТИ, Физтех, 141700, Долгопрудный, Московская область;
Федеральный научно-клинический центр физико-химической медицины им. Лопухина
Федерального медико-биологического агентства, Москва, Россия*

А. С. Богданова

*МФТИ, Физтех, 141700, Долгопрудный, Московская область;
Федеральный научно-клинический центр физико-химической медицины им. Лопухина
Федерального медико-биологического агентства, Москва, Россия*

А. Е. Томская

*МФТИ, Физтех, 141700, Долгопрудный, Московская область;
Кафедра микробиологии, биологический факультет, Московский государственный университет
им. М.В. Ломоносова, Москва, Россия*

Д. В. Клинов

*МФТИ, Физтех, 141700, Долгопрудный, Московская область;
Федеральный научно-клинический центр физико-химической медицины им. Лопухина
Федерального медико-биологического агентства, Москва, Россия*

**Стабилизация суспензий углеродных нанотрубок белками
для биомедицинских применений**

В последнее время был предложен ряд перспективных применений углеродных нанотрубок в биомедицинской области, включая создание подложек и каркасов для обеспечения эффективного выращивания клеток. В некоторых случаях именно волокнистая структура углеродных нанотрубок в сочетании с электрической проводимостью этого материала обеспечивают выполнение требований, выдвигаемым к таким подложкам.

В данной работе мы провели ряд исследований, направленных на разработку композитного материала из углеродных нанотрубок, покрытых белком — бычьим сывороточным альбумином. Было показано, что с его помощью можно получать стабильные суспензии из углеродных нанотрубок в воде и в дальнейшем формировать различные плоские и квази-трехмерные структуры на их основе. Благодаря изменению количества белка в суспензии, а также

© Бирюков С.И., Покровская А.Р., Матвеева А.Г., Богданова А.С., Томская А.Е., Клинов Д.В., 2026

сшиванию молекул белка при взаимодействии с глутаровым альдегидом, можно контролировать толщину белкового слоя. При этом также изменяется проводимость получаемых структур.

На рисунке представлены изображения углеродных нанотрубок в сплошной пленке белка (*а*), после уменьшения количества белка в суспензии с помощью фильтрования и ресуспендирования (*б*) и после сшивки молекул белка в суспензии с помощью глутарового альдегида (*в*). Видно, что после сшивки толщина белкового слоя составляет примерно 20—30 нм. При этом проводимость структур, изготовленных в одинаковых условиях, уменьшается на порядок.

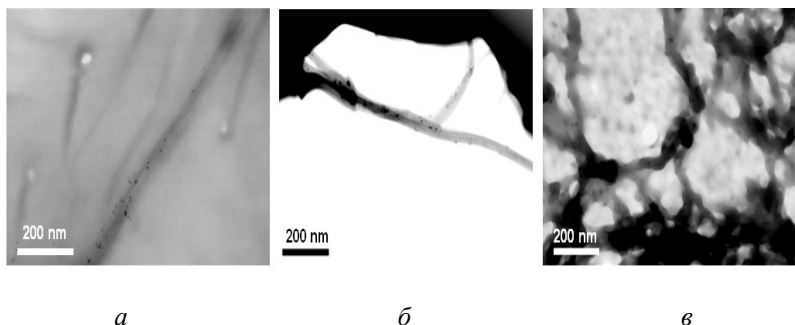


Рис. Изображения композитных структур нанотрубки + БСА:
а — после приготовления; *б* — после удаления излишков белка;
в — после сшивки белка с помощью глутарового альдегида

Работа выполнена при поддержке гранта РНФ 25-72-31032 «Получение наноструктурированных материалов и их суспензий» и проекта Министерства высшего образования и науки Российской Федерации FSMG-2023-0015 «Анализ токсичности и биосовместимости».

Е. Ю. Ван

Балтийский федеральный университет им. И. Канта, Калининград, Россия
evan@kantiana.ru, ORCID: 0000-0001-6952-9904, SPIN-код: 9927-5546

Ресурсосберегающие технологии при производстве и утилизации электрохимических источников тока

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

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

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

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

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

Например, заявлен способ утилизации отработанных химических источников тока (Патент RU, №2486262). Стадии передела: измельчение ХИТ, выщелачивание, магнитная сепарация и электролиз. Технология позволяет утилизировать химические источники тока на основе металлического Ni, Na, Ca, Cd, Mg, Ag, Pb и др. и одновременно получить товарную продукцию. Однако метод имеет ограничения, такие как необратимое структурное разрушение и зависимость от последующих стадий очистки для разделения металлов.

Для устранения этих недостатков было объединено пиро- и гидрометаллургическое обогащение. Например, предложен способ утилизации отработанных марганцево-цинковых ХИТ гидрометаллургическим способом (Патент RU, №2164955), предполагающий стадии измельчения, магнитной сепарации, окислительного обжига, флотации, выщелачивания серной кислотой и электролитического разделения цинка на катоде и марганца на аноде.

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

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

Е. Л. Васенькина¹, Я. А. Масютин²

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

¹ vlekaterina@kantiana.ru, ORCID: 0009-0008-3954-2081, SPIN-код: 1287-5770

² ORCID: 0000-0003-4347-3425, SPIN-код: 2467-9765

Получение и применение наноуглеродных материалов при изготовлении литий-ионных аккумуляторов и постлитиевых электрохимических источников тока

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

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

В работе в качестве основного компонента анодного материала рассматриваются электрохимические показатели карбонизированной целлюлозы, активированной различными катализаторами. Испытания проводятся в монетных корпусах форм-фактора 2016 против литиевого электрода. Используются коммерческий электролит 1.0 M LiPF₆ в EC:DEC = 1 : 1 и коммерческий сепаратор Celgard 2325. Испытания материала в качестве анодного материала НИА проводятся в монетных корпусах форм-фактора 2032. Применяются коммерческий электролит 1.0 M NaPF₆ в DIGLYME и стекловолоконный сепаратор марки Whatman Grade. В состав активной пасты для ЛИА и НИА, помимо основного исследуемого материала, также входят электропроводящая добавка, сажа марки Super Black, и связующий компонент 5%-ный раствор PVDF в NMP. Сборка испытательных макетов осуществляется в среде аргона, содержание кислорода и воды не превышает 2 ppm.

Кривые зависимости удельной емкости, а также зарядно-разрядные кривые тестовых испытаний приведены на рисунке.

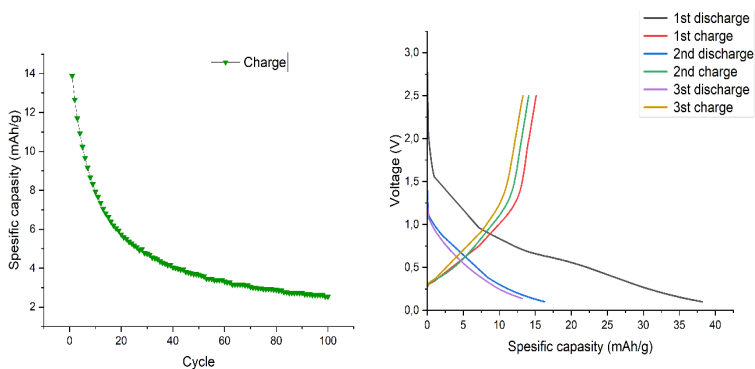


Рис. Кривые зависимости удельной емкости и тестовых испытаний

Полученные экспериментальные результаты показывают перспективность дальнейших исследований с применением новых мезо- и наноструктурированных функциональных углеродных материалов.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда №25-72-31032 (<https://rscf.ru/project/257231032/>).

А. А. Ворфоломеева¹, Ю. В. Федосеева², А. В. Окотруб³, Л. Г. Булушева⁴

Институт неорганической химии Сибирского отделения РАН, Новосибирск, Россия

¹ vorfolomeeva@niic.nsc.ru, SPIN-код: 6780-0517

² SPIN-код: 8340-1499

³ SPIN-код: 7408-8031

⁴ SPIN-код: 7251-8758

Влияние кислотной модификации однослойных углеродных нанотрубок на их взаимодействие с фосфором и электрохимические свойства в литий-ионных аккумуляторах

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

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

В нашей работе мы применили двухступенчатую обработку ОУНТ горячими минеральными кислотами с последующим отжигом в инертной атмосфере. Такая обработка привела к диспергированию нанотрубок, расщеплению пучков и образованию дефектов в боковых стенках. Согласно исследованиям методами ПЭМ, спектроскопии КРС и NEXAFS-спектроскопии, дефекты боковых стенок влияют на конденсацию паров фосфора, способствуя образованию коротких и неупорядоченных цепочек внутри ОУНТ. Взаимодействие термически испаренного лития с пустыми и заполненными фосфором ОУНТ изучалось с помощью модельных *in situ* экспериментов на источнике синхротронного излучения BESSY II. В случае перфорированных

ОУНТ, заполненных фосфором (P@hОУНТ), была обнаружена высокая дисперсность лития вдоль стенок нанотрубок и образование фосфида лития внутри ОУНТ. DFT-расчеты показали, что наличие инкапсулированного фосфора снижает энергетический барьер для проникновения лития внутрь ОУНТ через дефект боковой стенки. Электрохимические испытания подтвердили, что сочетание дефектов боковых стенок и инкапсуляции фосфора обладает синергетическим эффектом для повышения емкости. Электрод P@hОУНТ достиг удельной емкости 946—460 мАч/г (при плотностях тока 0,1—2 А/г), превосходя показатели необработанных фосфор-заполненных ОУНТ в два раза. Мы объясняем этот результат улучшенной диффузией ионов лития, которые через дефекты в стенках легко проникают к диспергированным частицам фосфора.

С. А. Вотяков¹, А. В. Осадчий²

Национальный исследовательский ядерный университет МИФИ, Москва, Россия;

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

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

¹ savotyakov99@yandex.ru, SPIN-код: 6027-1607

² ORCID: 0000-0002-6882-9953

Система объемно-локализованных электронных состояний в положительно заряженных полупроводниковых одностенных углеродных нанотрубках

В работе [1] было продемонстрировано существование объемно-локализованных электронных состояний с максимумом электронной волновой функции в центре одностенных углеродных нанотрубок (далее — ОУН), названных также pseudo-SAMO. Из-за специфической локализации таких состояний и их долгоживущего характера предполагается, что они хорошо огут себя зарекомендовать в нелинейных оптических элементах и лазерной технике. При зарядке полой наноструктуры количество таких состояний увеличивается в связи с наличием центрального кулоновского потенциала. Однако ранее система pseudo-SAMO не была продемонстрирована по аналогии с системой SAMO в заряженных фуллеренах. В настоящей работе представлены результаты теоретических расчетов, выполненных на основе теории функционала электронной плотности, для различных электронных состояний с максимумом в центре положительно заряженных ОУН; проведена классификация системы таких состояний.

Показано, что благодаря высокой и стабильной зарядке одностенных углеродных нанотрубок число объемных состояний в ОУН может быть весьма велико. Такие состояния в поперечном сечении трубки по своей форме идентичны водородоподобным SAMO в фуллеренах, но их форма вдоль оси нанотрубки иная. С ростом энергии, pseudo-SAMO в ОУН чередуются с состояниями, локализованными на поверхности, поскольку общий потенциал структуры представляет собой суперпозицию кулоновского потенциала и потенциала атомов стенки трубки; изменяются орбитальные квантовые числа pseudo-SAMO и увеличивается число лепестков вне нанотрубки.

В нанотрубках бесконечной длины, если орбитальные квантовые числа повторяются при более высоких энергиях, то меняется главное квантовое число. В одностенных углеродных нанотрубках конечной длины тенденция к возникновению pseudo-SAMO аналогична бесконечным структурам, но при этом происходит квантование вдоль оси нанотрубки z , что увеличивает число локализованных в объеме состояний: возникают дополнительные состояния, в которых новое квантовое число вдоль оси z увеличивается с ростом энергии для каждого орбитального и главного квантового числа.

Важно отметить, что система pseudo-SAMO практически не зависит от геометрии нанотрубки, а только от ее диаметра, поскольку эти состояния возникают благодаря наличию кулоновской ямы в центре нанотрубки, представляющей собой заряженный цилиндр. Были оценены времена жизни pseudo-SAMO в конечной ОУН. В данной нанотрубке время жизни pseudo-SAMO на 1—2 порядка превышает время жизни состояний, локализованных на поверхности, и обычно составляет около 10^8 с.

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

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

Список литературы

1. *Votyakov S. A., Osadchy A. V., Obratsova E. D.* System of metastable volume-localized electronic states in positively charged semiconductor single-wall carbon nanotubes // Carbon Trends. 2024. Vol. 15. P. 100340.

В. А. Грешняков

Челябинский государственный университет, Челябинск, Россия;
Балтийский федеральный университет им. И. Канта, Калининград, Россия
v.greshnyakov@yandex.ru, ORCID: 0000-0002-2686-374X, SPIN-код: 2627-5388

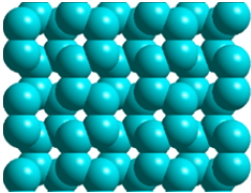
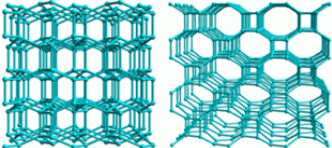
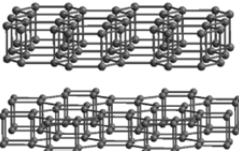
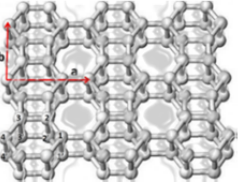
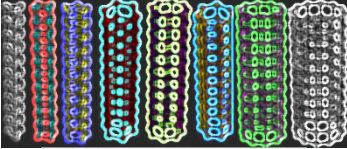
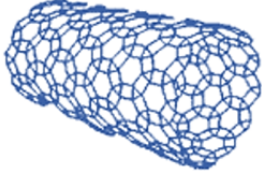
Теоретический поиск новых алмазоподобных соединений

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

Установлено, что полиморфы алмаза (табл.) могут иметь плотность, изменяющуюся в пределах от 1,21 до 3,67 г/см³, высокие значения твердости (49—94 ГПа), объемного модуля (141—450 ГПа), модуля Юнга (~200—1190 ГПа) и модуля сдвига (70—530 ГПа), а также могут проявлять себя не только как диэлектрики, но и как полупроводники. Некоторые из этих фаз при растягивающих нагрузках могут быть ауксетиками. Большой интерес представляют не только свойства алмазоподобных фаз, но и то, что они могут быть получены при сжатии наноструктур-предшественников (графеновых слоев, углеродных нанотрубок, фуллеренов). Поэтому исследование алмазоподобных фаз касается также актуальной темы изучения наноструктур и их практического использования при синтезе наноструктурированных алмазоподобных материалов.

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

Классификация углеродных алмазоподобных фаз и наноструктур по пространственной протяженности

3D	2D	1D
<p align="center">Полимеры алмаза</p>  <p align="center">Полиморфы алмаза</p> 	<p align="center">Алмазоподобные бислои</p>  	<p align="center">Призматические трубки и нанотубулярные супракристаллические структуры</p>  

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

Б. С. Ездин

Новосибирский государственный университет, Новосибирск, Россия
SPIN-код: 3613-8309

Ю. В. Пахаруков

Тюменский индустриальный университет, Тюмень, Россия
ORCID: 0000-0002-3203-8893, SPIN-код: 3102-6911

С. А. Васильев

Новосибирский государственный университет, Новосибирск, Россия
SPIN-код: 8189-5239

Р. Ф. Сафаргалиев

Тюменский индустриальный университет, Тюмень, Россия
SPIN-код: 7815-6542

Ф. К. Шабиев

Тюменский государственный университет, Тюмень, Россия;
Тюменский индустриальный университет, Тюмень, Россия
faridshab@mail.ru, ORCID: 0000-0003-0551-3836, SPIN-код: 3093-2362

Анодный материал на основе кремний-углеродных наночастиц «ядро-оболочка»

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

Синтез структур Si@C проводили в циклическом реакторе сжатия, совмещающая пиролиз моносилана и легких углеводородов [3]. Реактор «поршень-цилиндр» (объем 0,3 л, частота 10 Гц) доказал эффективность для получения кремниевых наночастиц [4]. Вблизи верхней мертвой точки создаются высокие давление и температура (максимум 12 МПа). Для повышения температуры пиролиз вели в аргоне. Давление при совместном пиролизе составило 3,5—8,5 МПа, что выше, чем для чистого моносилана (2—5 МПа) [4].

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

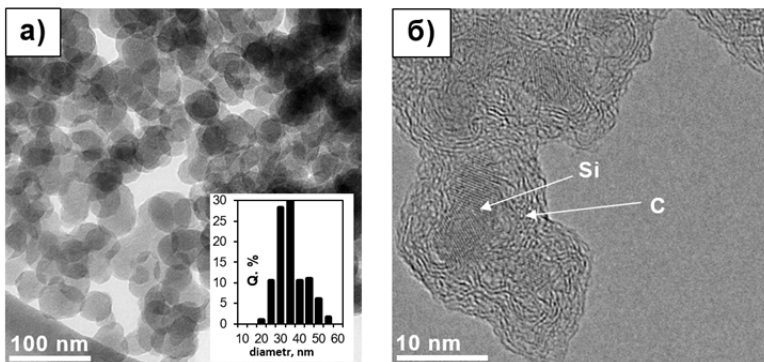


Рис. ТЭМ изображение наночастицы Si@C:
 а — скопление части (на вставке распределение по размерам частиц);
 б — увеличенное изображение частицы Si@C, где Si — ядро, С — оболочка

Полученная наночастица Si@C является подходящей основой для создания анодного материала литий-ионных аккумуляторов.

Исследование выполнено за счет гранта РФФ № 25-71-00047.

Список литературы

1. Gonzalez A. F., Yang N. H., Liu R. S. et al. Silicon anode design for lithium-ion batteries: progress and perspectives // J Phys Chem C. 2017. Vol. 121 (50). P. 27775—27787. doi: 10.1021/acs.jpcc.7b07793.
2. Ездин Б. С., Васильев С. А., Окотруб А. В. и др. Синтез композитных Si@C-наночастиц для анодных материалов в циклическом реакторе сжатия // Письма в Журнал технической физики. 2023. Т. 49, вып. 12. С. 39—42.
3. Ezdin B., Yatsenko D., Kalyada V. et al. Data on the Structure, Chemical State of Silicon Carbide Synthesized by Adiabatic Cyclic Compression in a Chemical Reactor // Data in Brief. 2020. Vol. 28. P. 104868: 1—7. doi: 10.1016/j.dib.2019.104868.
4. Ezdin B. S., Kalyada V. V., Yatsenko D. A. et al. Synthesis of Si nanoparticle chains and nanowhiskers by the monosilane decomposition in an adiabatic process during cyclic compression // Powder Technol. 2021. Vol. 394. P. 996—1003.

А. А. Загузина¹, А. А. Ворфоломеева², А. В. Окотруб³, Л. Г. Булушева⁴

Институт неорганической химии Сибирского отделения РАН, Новосибирск, Россия

¹ kotsun@niic.nsc.ru, SPIN-код: 6080-9870

² SPIN-код: 6780-0517

³ SPIN-код: 7408-8031

⁴ SPIN-код: 7251-8758

Гибридные материалы на основе MoS₂ и rGO для низкотемпературных Li- и Na-ионных аккумуляторов

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

На роль анода в таких системах может подойти дисульфид молибдена (MoS₂). Его преимущества обусловлены уникальной слоистой архитектурой с увеличенным расстоянием между слоями и значительной теоретической емкостью (669 мАч/г). Тем не менее практическому применению MoS₂ препятствуют его низкая собственная электропроводность и прогрессирующая структурная деградация в процессе длительного циклирования. Эффективной стратегией преодоления этих ограничений является создание гибридов на основе MoS₂ и проводящей углеродной компоненты, например, восстановленного оксида графена (rGO). Подобная модификация способствует структурной стабилизации анода, что проявляется в снижении внутреннего сопротивления при измерении спектров электрохимического импеданса электрода и повышении кулоновской эффективности электрохимических процессов. Данные эффекты важны для обеспечения работы аккумулятора в условиях низких температур.

Объектами исследования в данной работе были гибридные материалы на основе MoS₂ и rGO, синтезированные быстрым термолизом прекурсоров (NH₄)₂MoS₄ и оксида графена при температурах образования высококристаллизованной фазы MoS₂ (выше 600 °С). Электрохимическое тестирование осуществляли в двухэлектродных ячейках. Испытания проводили в контролируемом температурном режиме в диапазоне от комнатной температуры до –20 °С. Гибрид MoS₂/rGO_600 продемонстрировал значительные удельные емкости при комнатной температуре в ЛИА: 1095 и 1050 мАч/г при 1 и 2 А/г на 24-м и 32-м цикле. При снижении температуры и увеличении плотности тока до 2 А/г образец сохранил 62 и 22 % емкости. Это объясняется избытком серы в образце, синтезированном при 600 °С, по сравнению с аналогом. В НИА в условиях низкой температуры лучшие показатели продемонстрировал гибрид MoS₂/rGO_700. Для него сохранение емкости составило 66 и 48 % при 0 °С и при плотности тока 0,1 и 2 А/г. Высокие значения в НИА объясняются обогащением структуры вертикально ориентированными слоями MoS₂, которые ковалентно связаны с поверхностью rGO.

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

Р. Р. Исмагилов

Московский государственный университет имени М. В. Ломоносова, Москва, Россия;
Балтийский федеральный университет им. И. Канта, Калининград, Россия
ismagil@polly.phys.msu.ru, ORCID: 0000-0001-9662-1466, SPIN-код: 3488-7429

Формирование текстурированных алмазных пленок и иглоподобных кристаллитов методом осаждения из газовой фазы

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

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

С. Н. Кашин

Федеральный исследовательский центр проблем химической физики и медицинской химии РАН,
Черноголовка, Россия;
Балтийский федеральный университет им. И. Канта, Калининград, Россия
SN.Kashin@yandex.ru, SPIN-код: 2114-1841

Е. В. Дворецкая

Федеральный исследовательский центр проблем химической физики и медицинской химии РАН,
Черноголовка, Россия
SPIN-код: 6953-9880

Р. Б. Моргунов

Федеральный исследовательский центр проблем химической физики и медицинской химии РАН,
Черноголовка, Россия;
Балтийский федеральный университет им. И. Канта, Калининград, Россия
ORCID: 0000-0002-4859-2733, SPIN-код: 9834-3340

Структурно-зависимые магнитные свойства графена на никелевой подложке

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

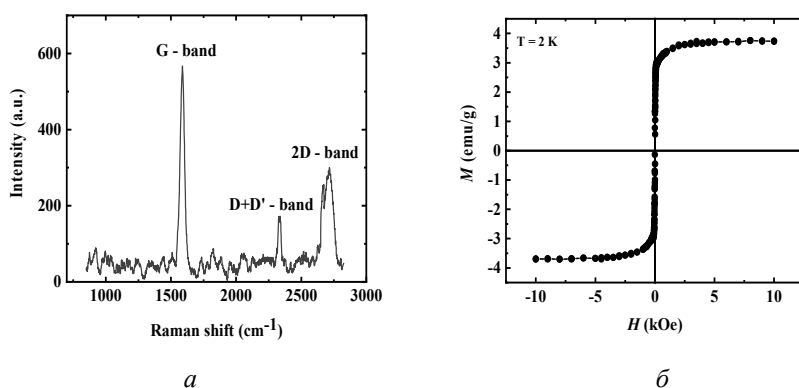


Рис. Рамановский спектр образца (*a*); полевая зависимость магнитного момента графена, полученная вычитанием вклада подложки при температуре 2 К (*b*)

Петля гистерезиса при температуре $T=2$ К (рис., *b*) характеризуется намагниченностью насыщения $M_s \sim 4$ етл/г и коэрцитивной силой $H_c \sim 14$ Ое, что типично для систем с индуцированным поверхностным магнетизмом, возникающим вследствие взаимодействия π -электронов углерода с 3D-орбиталями никеля [1; 3]. Магнитный момент в магнетонах бора на атом углерода составляет 0,01 μ_B /атом, что близко к значению 0,05 μ_B /атом, полученного для такой системы в [4]. Результаты исследования согласуются с [3; 4], где отмечается возникновение ферромагнитного упорядочения в графеновых слоях, осажденных на ферромагнитных подложках.

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

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

Список литературы

1. *Dedkov Y.S., Fonin M.* Electronic and magnetic properties of the graphene-ferromagnet interface // *New Journal of Physics*. 2010. Vol. 12. P. 125004.
2. *Sparavigna A. C.* Graphene and graphene oxide (raman spectroscopy). URL: https://www.researchgate.net/publication/380496611_Graphene_and_Graphene_Oxide_Raman_Spectroscopy (дата обращения: 17.10.2025).
3. *Voloshina E., Dedkov Y.S., Generalov A. et al.* Electronic structure and magnetism of graphene on metals // *Physical Chemistry Chemical Physics*. 2011. Vol. 13. P. 12203—12210.
4. *Weser M., Rehder Y., Horn K. et al.* Induced magnetism of carbon atoms at the graphene/Ni(111) interface // *Applied Physics Letters*. 2010. Vol. 96, № 1. P. 012504.

**А. Г. Клабукова¹, Н. А. Бердников, И. В. Баринов
В. В. Савин², Л. А. Савина³**

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

¹ agklabukova@stud.kantiana.ru

² ORCID: 0000-0002-7166-4133, SPIN-код: 2991-3180

³ ORCID: 0000-0002-8181-5169, SPIN-код: 4201-9980

Разработка анодного материала для Ni-MH аккумуляторов на основе соединения LaNi_5C магнитными (ЗЖС ГРП Fe-Nd-B) и углеродными (УНТ) функциональными добавками

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

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

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

С учетом выявленных тенденций сформулированы следующие задачи для экспериментальных поисковых исследований: 1) изготовление серии анодных материалов на основе порошкового ЗЖС ГРП заданной фракции (в диапазоне +10—640 мкм) сплава системы Ni-Co-TM1-TM2-La-REM, где TM1 = Al, TM2 = Zr, REM = MM, который получен методом ЗЖС по технологии распыления струи расплава потоком инертного газа низкого давления (ГРП) с последующей механохимической обработкой в высокоэнергетической вибрационной шаровой мельнице *Emax* или планетарной шаровой мельнице PM100 с добавками различных видов НУМ, в том числе многостенных углеродных нанотрубок и ЗЖС ГРП (оптимального фракционного состава) магнитного сплава системы Fe-Nd-B; 2) изучение физико-химических свойств

и структурно-фазового состояния синтезированных материалов; 3) изготовление лабораторных прототипов аккумуляторов и проведение цикла электрохимических испытаний (тестирования).

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

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

А. Г. Клабукова, Н. А. Бердников¹, И. С. Жеребцов, В. В. Савин²

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

¹ naberdnikov@stud.kantiana.ru

² ORCID: 0000-0002-7166-4133, SPIN-код: 2991-3180

Получение аморфных и алмазоподобных нанюглеродных материалов

Для синтеза нанюглеродных материалов с аморфной и алмазоподобной структурой использовали метод механохимической активации (далее — МХА) в высокооборотной шаровой мельнице РМ100. В качестве исходного сырья применялся графит марки МПГ-7 (согласно ТУ 48-4807-297-00). Процесс обработки осуществлялся при скорости вращения 1000 об/мин в течение 18 часов, а затем при 1500 об/мин на протяжении 10 часов.

Установлено, что помимо изменения формы частиц от угловатой к сферической и уменьшения их размеров до диапазона 1—2 мкм (96,59% частиц), наблюдалась тенденция к коагуляции среди микронных частиц. Наночастицы, в свою очередь, не проявляли склонности к слипанию.

Анализ изменений в составе порошков показал повышение концентрации кислорода и железа с увеличением времени обработки. Предполагается, что кислород поступает из остаточной атмосферы, присутствующей в мельнице, а железо — из материала мелющих тел. Важно отметить, что после 8 часов МХА при 1500 об/мин произошло самовозгорание порошка. Вероятно, это связано с достижением критического размера частиц и достаточным содержанием кислорода и железа, играющих роль катализаторов реакции окисления. Образец с более высоким содержанием кислорода и меньшим количеством железа не воспламенился.

Ранее в работе [1] было продемонстрировано, что при обработке графита в вибрационной мельнице *Emax* происходило выгорание аморфной фазы графита после 12 часов воздействия.

Рентгенодифрактометрические исследования, проведенные на дифрактометре *Discover D8* «Брукер» с использованием Cu -излучения, выявили изменения и смещения пиков графита, указывающие на формирование как алмазоподобного, так и аморфного углерода. Данные рамановской спектроскопии свидетельствуют о преобладании алмазоподобного углерода над аморфным в конечном образце.

Так, продемонстрирована возможность получения нанюглеродных материалов с аморфной и алмазоподобной структурой посредством механохимической обработки графита марки МПГ-7 в высокоскоростной шаровой мельнице РМ100 и высокоэнергетической вибрационной шаровой мельнице *Emax*.

Список литературы

1. Чайка В.А., Савин В.В., Савина Л.А. и др. Применение механохимической обработки графита в планетарных шаровых мельницах для получения легированных кремнием углекомпонитных окатышей // Известия высших учебных заведений. Сер. Химия и химическая технология. 2018. Т. 61 (11). С. 38—42.

В. И. Клещ

*Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, Москва, Россия;
Балтийский федеральный университет им. И. Канта, Калининград, Россия
klesch@polly.phys.msu.ru, ORCID: 0000-0001-5272-4711, SPIN-код: 4991-0126*

Эмиссия электронов из углеродных наноструктур

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

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

Е. И. Климова¹, О. О. Молоканова, О. А. Молоканова²

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

¹ EIKlimova@kantiana.ru, SPIN-код: 4907-1590

² ORCID: 0000-0002-1057-598, SPIN-код: 6284-8818

Влияние формы высокодисперсных углеродных наноструктур на частотные зависимости электрических характеристик композитов на основе органосилоксанов

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

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

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

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

Напротив, введение сферических углеродных частиц приводило к кардинальному изменению частотной зависимости импеданса. Композиты с 5 мас.% сферического наполнителя характеризовались частотно-независимым импедансом и проявляли скачкообразное уменьшение активной компоненты со-

противления (Re) в 1,5—10 раз в области критических частот 120—280 кГц. Наблюдаемый переход от диэлектрического к резистивному типу поведения свидетельствует о принципиальном изменении механизма электропроводности.

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

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

И. А. Копп

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

Электропроводящие композитные волокна с углеродными наноструктурами. Создание технологии и запуск производства

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

Продукция компании изготавливается из композитного волокна, состоящее из различных полимеров (ПП, ПА6 и ПЭ) и углеродных концентратов (CNT) с широким диапазоном показателя электрического сопротивления, что позволяет создавать сверхтонкие и энергоэффективные нагревательные поверхности для широких диапазонов напряжения — от 5 до 220 В. Компания производит композитную нить в диапазоне от 15 кОм до 10 МОм.

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

Главные преимущества композитного волокна «АМПЕРТЕКС»:

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

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

Сферы применения:

- БПЛА и авиастроение;
- автомобилестроение;
- легкая промышленность;
- строительство и ЖКХ: антиобледенительные системы и т. д.;
- транспортная инфраструктура;
- электроника и телекоммуникации.

Основные проблемы и вопросы в ходе разработки технологии:

- взаимодействие с НИИ, вузами и институтами развития;
- авторское право;
- патентование;
- масштабирование технологии;
- сотрудничество с инжиниринговыми центрами и профильными лабораториями.

**А. А. Кострина¹, А. В. Цибульникова², И. И. Лятун³
В. В. Брюханов⁴, И. Г. Самусев⁵**

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

¹ akostrina@stud.kantiana.ru, SPIN-код: 3391-8093

² SPIN-код: 5617-6118

³ SPIN-код: 9978-7640

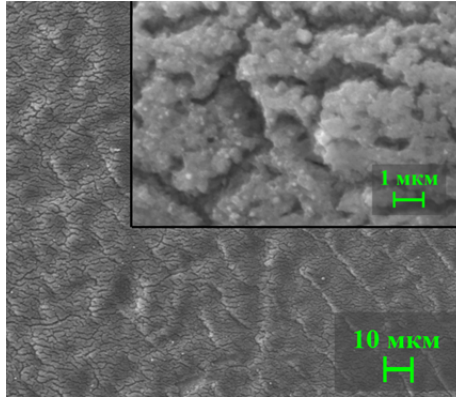
⁴ SPIN-код: 9096-1651

⁵ ORCID: 0000-0001-5026-751, SPIN-код: 1951-2070

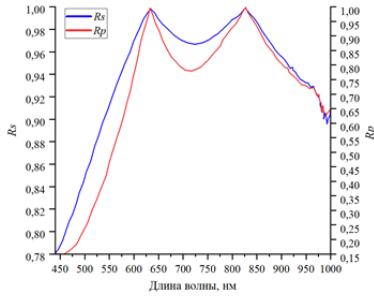
Плазмонные свойства и аномальная дисперсия в оптических спектрах пористой лазерно-структурированной поверхности анодированного титана

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

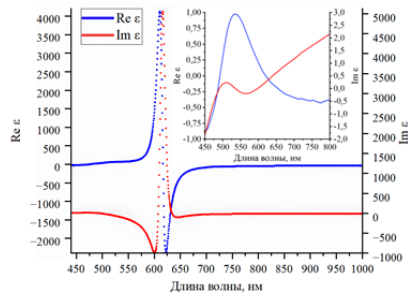
Полученные в результате лазерного структурирования поверхности образцов характеризуются наличием массивов нанопор от 300 до 1100 нм (рис., *а*), в которых происходит резонансная локализация электромагнитного поля. В спектрах отражения выявлены минимумы, соответствующие возбуждению поверхностных плазмонов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



a



б



в

Рис. Результаты исследования образца методами СЭМ и эллипсометрии: *a* — пористые образования на поверхности образца; *б* — спектры отражения поляризованного излучения; *в* — спектры ДП; вставка — спектры ДП поверхности анодированного титана

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

В. Л. Кузнецов

Институт катализа СО РАН, Новосибирск, Россия
kuznet@catalysis.ru, SPIN-код: 8795-9641

Коммерческие многостенные углеродные нанотрубки: сравнительное исследование

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

Первые производства многостенных УНТ (далее — МУНТ) появились в начале 2000-х гг. Так, в 2004 г. было известно более 50 производителей, которые могли синтезировать до 70 тонн трубок в год. Широкомасштабное промышленное производство УНТ появилось в 2007—2008 гг. (Bayer Material Science, Nanocyl, Archema). К 2014 г. мировое производство достигло 3500 тонн, что в основном определялось уровнем их потребления. Сразу же выяснилось, что потребительские свойства УНТ в значительной степени зависят от множества параметров, таких как распределение по диаметру, дефектность, морфология первичных продуктов. Особое внимание было уделено их качеству, в частности, наличию металлических и углеродистых примесей, а также однородности и структурной целостности. Появилось понимание, что для различных приложений необходимы УНТ с определенными характеристиками.

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

В докладе представлены сравнительные характеристики репрезентативного набора коммерческих МУНТ, производимых рядом ведущих компаний, и МУНТ, получаемых в Институте катализа СО РАН. В качестве методов контроля и характеристики нанотрубок были использованы просвечивающая электронная микроскопия (далее — ПЭМ) в сочетании с энергодисперсионной спектроскопией (далее — ЭДС), растровая электронная микроскопия (да-

лее — РЭМ), рентгенофазовый анализ (далее — РФА), спектроскопия комбинационного рассеяния (далее — СКР), низкотемпературная адсорбция азота (далее — НАА), гелиевой пикнометрии и др.

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

В докладе представлены сравнительные характеристики некоторых композиционных материалов, полученных с использованием коммерческих МУНТ, в том числе с использованием нанотрубок Института катализа СО РАН. Установлено, что для ряда приложений МУНТ производства ИК СО РАН превосходят зарубежные аналоги. В качестве примера на рисунке 1 приведены результаты сравнения электропроводящих свойств покрытий на основе эпоксидного связующего с МУНТ производства LG Chem, CNano, Nanocyl и ИК СО РАН. Можно видеть, что с использованием МУНТ производства ИК СО РАН высокая проводимость достигается при существенно более низких содержаниях МУНТ в композите.

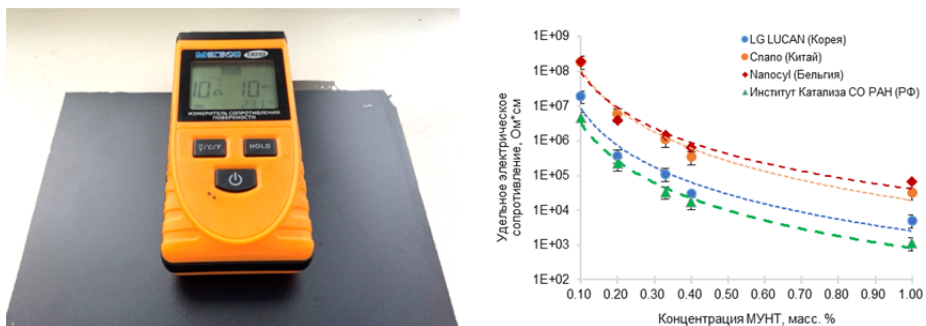


Рис. 1. Образец эпоксидного покрытия с МУНТ и сравнение электропроводящих свойств покрытий на основе эпоксидного связующего с МУНТ производства LG Chem, Cnano, Nanocyl и ИК СО РАН

Одним из перспективных применений МУНТ является модификация резиновых компаундов для производства шин. При введении МУНТ в состав резины углеродные нанотрубки образуют армирующий и электропроводящий каркас в полимерной матрице. На рисунке 2 приведено влияние использования МУНТ на физико-механические свойства резины на основе SBR. Можно видеть, что с применением МУНТ значительно вырастает сопротивление раз-

диру и условная прочность при 100 и 200%-ном удлинении. Подобный рост показателей также отражается в улучшении таких эксплуатационных характеристик шин, как износостойкость, сцепление с сухой и мокрой дорогой. Авторами была разработана универсальная добавка для шин и РТИ — концентрат МУНТ, совместимый с резинами на основе SBR, NR и BR.

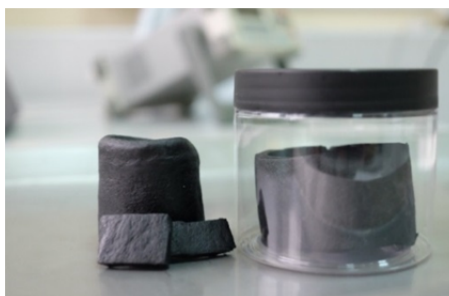


Рис. 2. Влияние МУНТ на физико-механические свойства резин на основе SBR; концентрат на основе МУНТ производства ИК СО РАН

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

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

Е. А. Кулакова

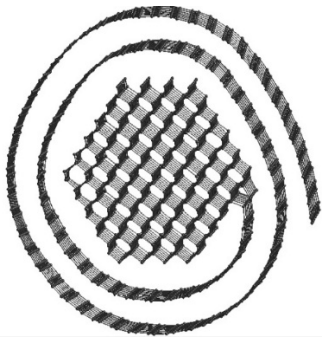
Челябинский государственный университет, Челябинск, Россия
Балтийский федеральный университет им. И. Канта, Калининград, Россия,
lelya.kulakova.2003@yandex.ru

Изучение особенностей формирования свиткообразных углеродных наноструктур в рамках молекулярно-механического моделирования

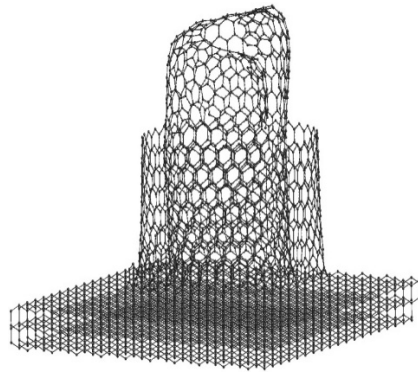
Углеродные наносвитки, подобно углеродным нанотрубкам, обладают высокой электро- и теплопроводностью, а также хорошими механическими свойствами, поэтому могут применяться в области изготовления литий-ионных батарей, суперконденсаторов и датчиков. Однако структура таких наносвитков еще не до конца изучена.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

Расчеты были произведены в рамках молекулярно-механического метода ММ2, поскольку он позволяет рассчитывать структуры размерами до 10 тысяч атомов. Кроме того, параметры алмаза и графита, рассчитанные данным методом, хорошо согласуются с параметрами, установленными экспериментальным путем.

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



a



б

Рис. Примеры структур углеродных наноструктур:
a — с ядром из наноалмаза; *б* — связанного с поверхностью алмаза

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

Е. И. Куницына¹, Р. Б. Моргунов²

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

Балтийский федеральный университет имени И. Канта, Калининград, Россия

¹ kunya_kat@mail.ru, SPIN-код: 9561-0660

² ORCID: 0000-0002-4859-2733, SPIN-код: 9834-3340

Структурные и магнитные особенности углеродных нанотрубок, синтезированных каталитическим методом

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

С помощью рамановской спектроскопии удалось разделить образцы с многостенными (кривая 1 на рис., *a*) и одностенными УНТ (кривая 2 на рис., *a*). Анализ гистерезисов двух исследуемых образцов позволил установить, что многостенные УНТ содержат меньшую долю магнитных включений (остатков каталитического железа и его соединений), по сравнению с одностенными УНТ. С другой стороны магнитные включения, образующиеся в многостенных УНТ в процессе CVD-синтеза, обладают большими размерами по сравнению с теми, которые возникают в одностенных УНТ (рис., *b*).

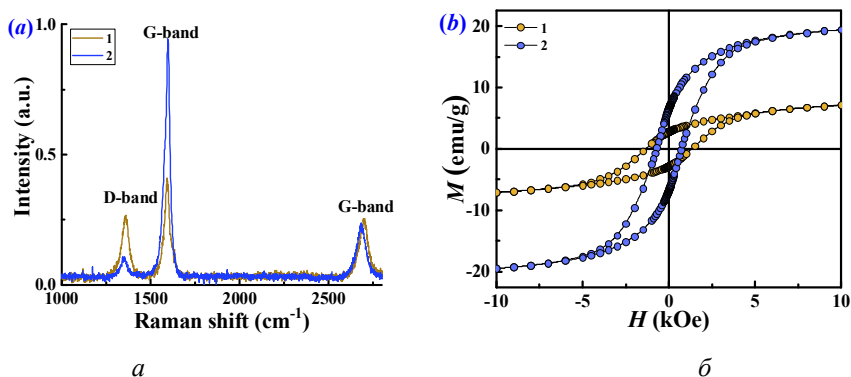


Рис. Рамановские спектры образцов (*a*);
зависимости магнитного момента образцов от поля при температуре 2 К (*b*)

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

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

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

Г. С. Куприянова¹, И. Г. Мершиев²

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

¹ GKupriyanova@kantiana.ru, ORCID: 0000-0002-3508-094X, SPIN-код: 9601-2474

² SPIN-код: 5264-6824

¹³C ЯМР как метод изучения структуры углеродных материалов

Углеродные материалы, такие как графен и его разнообразные формы, графит, фуллерены, нанотрубки, аморфный углерод, на протяжении последних лет привлекают к себе особое внимание [1]. Интерес связан с тем, что они проявляют необычные физические свойства, и находят все более широкое применение.

Синтез модифицированных структур на основе углеродных материалов требует развитие новых методов анализа для детального определения их структуры. Зачастую модифицированные структуры являются гетерогенными и некристаллическими, что затрудняет применение рентгеновского анализа. Ядерный магнитный резонанс (далее — ЯМР) на ядрах ¹³C — это один из наиболее информативных неразрушающих методов установления локальной структуры и электронных свойств углеродных материалов [2]. Благодаря чувствительности химического сдвига к гибридизации атомов углерода, электронной плотности и топологии структуры, ¹³C ЯМР позволяет выявить различия в формах углерода. Методы твердотельного ¹³C ЯМР с использованием вращения образца под магическим углом (далее — ВМУ) позволяют получать спектры высокого разрешения даже для неупорядоченных систем. Одно из важных преимуществ ¹³C ЯМР заключается в возможности различать сигналы от углеродов различной sp-, sp²-, sp³ гибридизации. В идеальном графите все атомы находятся в sp²-гибридизации, и его ¹³C ЯМР-сигнал $\delta \sim 125$ ppm. Графен, будучи однослойной формой графита, демонстрирует сдвиг, близкий к $\delta \sim 123$ ppm, что отражает его двумерную природу и отсутствие межслоевого взаимодействия. В окисленном графене спектр становится сложнее: помимо сигнала sp²-углерода (~ 130 — 135 м. д.), появляются пики, соответствующие эпоксидным (50 — 60 м. д.) и гидроксильным (60 — 80 м. д.) группам.

Использование двумерной двухквантовой ¹³C ВМУ ЯМР спектроскопии позволило выявить степень связанности углерода sp², эпоксидных СОС и СОН групп и однозначно доказать, что атомы углерода СОН и СОС связаны напрямую [3]. ¹³C ЯМР особенно эффективен для анализа одностенных и многостенных нанотрубок благодаря зависимости химического сдвига от диаметра и типа проводимости. Было установлено, что химические сдвиги для металлических нанотрубок с диаметром < 1 нм и полупроводниковых различаются на 3 — 4 м. д.: s-SWCNT ($d \approx 0,8$ нм) ~ 125 м. д., m-SWCNT ($d \approx 0,8$ нм): ~ 122 м. д. С увеличением диаметра ($> 1,4$ нм) эта разница меняет знак: сигнала

лы для m-SWCNT сдвигаются вниз по полю, а для s-SWCNT — вверх [4]. Фуллерен C₆₀ демонстрирует один узкий пик при $\delta = 143$ ppm, что обусловлено высокой симметрией молекулы. При функционализации фуллеренов симметрия нарушается, и спектр усложняется: появляются сигналы в диапазоне 140—150 ppm, отражающие новые химические окружения. Особую сложность представляет изучение аморфного углерода.

Как показали наши исследования, сигнал ¹³C ЯМР представляет наложение сигналов от нескольких углеродных форм. Анализ спектра позволил выявить сигналы графена и фуллерена. Но ряд сигналов идентифицировать не удалось. Требуется развитие как новых экспериментальных ЯМР методов, так и методов математической обработки перекрывающихся сигналов для идентификации углеродных структур.

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

Список литературы

1. Backes C., Abdelkader A. M., Alonso C. et al. Production and processing of graphene and related materials // 2D Materials. 2020. Vol. 7. P. 022001. doi: 10.1088/2053-1583/ab1e0a.
2. Maxwell D. C., O'Keefe C. A., Xu C., Grey C. P. ¹³C NMR study of the electronic structure of lithiated graphite // Physical Review Materials. 2023. Vol. 7. P. 065492.
3. Engrakul C., Irurzun V. M., Gjersing E. L. et al. Protonation of Carbon Single-Walled Nanotubes Studied Using ¹³C and ¹H-¹³C Cross Polarization Nuclear Magnetic Resonance and Raman Spectroscopies // J. Am. Chem. Soc. 2012. Vol. 134. P. 4850—4856.
4. Casabianca L. B., Shaibat M. A., Cai W. W. et al. NMR-Based Structural Modeling of Graphite Oxide Using Multidimensional ¹³C Solid-State NMR and ab Initio Chemical Shift Calculations // J. Am. Chem. Soc. 2010. Vol. 132. P. 5672—5676.

В. А. Куракин

Лаборатория 2D наноматериалов в электронике, фотонике и спинтронике,
Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ», Москва, Россия
fromkurakin@mail.ru, SPIN-код: 3723-3064

Т. Н. Коберник

Центр энергетических технологий, Сколковский институт науки и технологий, Москва, Россия
SPIN-код: 9654-2912

Топология и электротранспортные характеристики углеродных полипризматов

Углеродные полипризматы (далее — УПП) можно отнести к алмазоподобным фазам, поскольку все атомы углерода (C) в УПП находятся в sp^3 -гибридизованных состояниях. УПП или $C_{[n, m]}$ -призматы состоят из m -угольных атомных колец, уложенных слоями вдоль их общей оси симметрии на идентичных расстояниях друг от друга (n — количество таких колец) (рис.). Согласно проведенным ранее DFT-расчетам, $C_{[n, m]}$ -призматы могут обладать металлической проводимостью [1], что крайне нехарактерно для большинства алмазоподобных фаз. Актуальность настоящего исследования определяется необходимостью понять причины, обуславливающие электронные свойства УПП. Целью работы является расчет электронных зонных структур $C_{[n, m]}$ -призматов в рамках sp^3 -модели сильной связи.

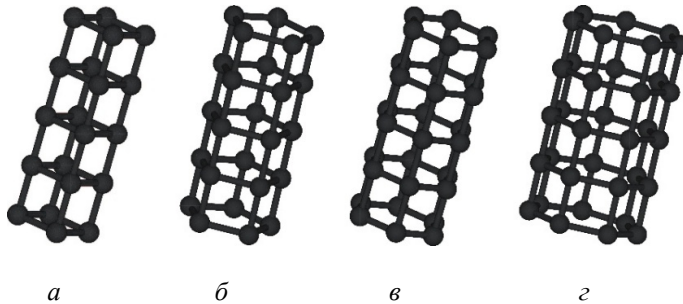


Рис. Периодические ячейки:

a — $C_{[n, 4]}$; b — $C_{[n, 5]}$; v — $C_{[n, 6]}$; z — $C_{[n, 7]}$ -призматов,
транслирующиеся вдоль их осей симметрии

Для изучения электротранспортных свойств $C_{[n, 4]}$ -, $C_{[n, 5]}$ -, $C_{[n, 6]}$ - и $C_{[n, 7]}$ -призматов при $n \rightarrow \infty$ (длинных УПП) мы применили sp^3 -модель сильной связи из работы [2]. Полученные нами результаты свидетельствуют о том, что для таких $C_{[n, 4]}$ -призматов характерны весьма широкие запрещенные зоны (~ 2 — 10 eV).

В свою очередь, у длинных $C_{[n, m]}$ -призманы при $m \geq 5$ (в том числе и при $m \rightarrow \infty$) полностью отсутствуют запрещенные зоны, то есть любой из этих УПП может выступать в роли хорошего проводника электрического тока. Мы считаем, что электронные характеристики $C_{[n, m]}$ -призманы обусловлены прежде всего их топологиями, а не конкретными химическими свойствами C . Мы предсказываем, что аналогичное электротранспортное поведение будет проявляться и у полипризманы из других химических элементов, например, кремния (Si) или германия (Ge).

Продемонстрированные в настоящем исследовании электронные характеристики УПП обладают большой практической значимостью, так как открывают новые перспективы применения этих 1D-наносистем в качестве субнанометровых проводов, игл туннельных микроскопов и других инертных проводящих компонентов нанoeлектронных устройств.

Список литературы

1. Maslov M.M., Grishakov K.S., Gimaldinova M.A., Katin K.P. Carbon vs silicon polyprismanes: a comparative study of metallic sp^3 -hybridized allotropes // Fullerenes, Nanotubes and Carbon Nanostructures. 2019. Vol. 28 (2). P. 97.
2. Slater J. C., Koster G. F. Simplified LCAO Method for the Periodic Potential Problem // Physical Review. 1954. Vol. 94 (6). P. 1498—1524.

Г. А. Малютенко

Тюменский государственный университет, Тюмень, Россия

Ф. К. Шабиев

Тюменский государственный университет, Тюмень, Россия;

Тюменский индустриальный университет, Тюмень, Россия

faridshab@mail.ru, SPIN-код: 3093-2362

Ю. В. Пахаруков

Тюменский индустриальный университет, Тюмень, Россия

ORCID: 0000-0002-3203-8893, SPIN-код: 3102-6911

А. В. Шабиева

Тюменский медицинский университет, Тюмень, Россия

Р. Ф. Сафаргалиев

Тюменский индустриальный университет, Тюмень, Россия

SPIN-код: 7815-6542

Плоские тепловые волны на границе раздела «графеносодержащая наножидкость — углеводород»

Наноархитектоника — новое междисциплинарное научное направление, изучающее процессы самоорганизации и самосборки с целью создания новых материалов с управляемой архитектурой, получила название [1]. Высокой степени самоорганизации подвержены углеродные наночастицы [2; 3], в результате которой следует ожидать нелинейные закономерности в процессах тепломассопереноса. Так в работе [2] показано наличие тепловых неоднородностей в процессе роста наноструктурированной пленки на основе графена и молекул углеводородов. Поскольку температура и теплоотвод — параметры, влияющие на конечную структуру наноструктурированной пленки, важно детально изучить процессы теплопереноса в подобных системах. Итак, целью данной работы является исследование теплопереноса в тонких пленках в процессе их формирования на границе «графеносодержащая наножидкость — октан».

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

В результате наблюдения за процессами роста пленок установлено появление тепловых волн (рис).

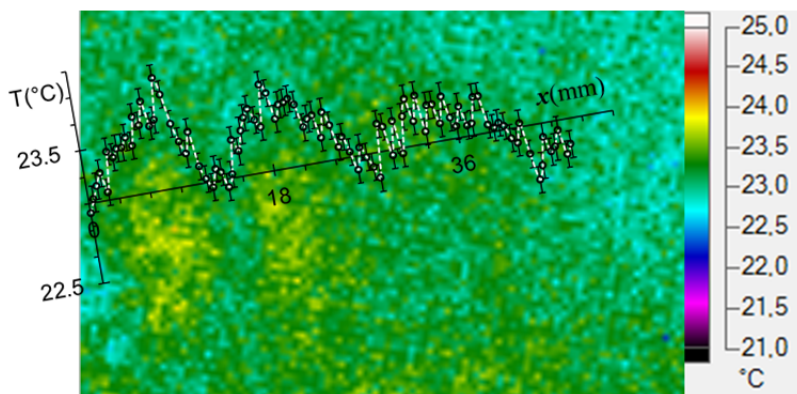


Рис. Тепловая картина области роста пленки
(на вставке — профиль поля температур по выделенной линии)

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

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

Список литературы

1. Ariga K., Watanabe S., Mori T., Takeya J. Soft 2D nanoarchitectonics // NPG Asia Materials. 2018. Vol. 10 (4). P. 90—106.
2. Пахаруков Ю.В., Шабиев Ф.К., Сафаргалиев Р.Ф., Галунин Е.В. Иерархия процессов самоорганизации и самосборки на примере роста пленок на границе «углеводород—графеновый нанофлюид» // Журнал технической физики. 2025. Т. 95. С. 565—574.
3. Ezdin B., Pakharukov Y., Kalyada V. et al. The novel method of synthesis of nanostructured materials for the enhancing recovery in oil displacement technologies // Catalysis Today. 2022. Vol. 397. P. 249—256.

О. А. Молоканова

Балтийский федеральный университет им. И. Канта, Калининград, Россия
otomskaliuk1@kantiana.ru, ORCID: 0000-0002-1057-598, SPIN-код: 6284-8818

Материаловедческие основы создания электропроводящих композитных волокон с углеродными наноструктурами

Создание материалов с заданным набором эксплуатационных свойств на основе полимерных композитов (далее — ПК) — одно из приоритетных направлений в науке. ПК по функциональному признаку можно разделить на конструкционные материалы, то есть материалы с улучшенными механическими свойствами (прочностью, модулем жесткости, ползучестью, релаксационными и другими свойствами) и материалы со специальными свойствами (тепловыми, оптическими, электрофизическими, антибактериальной и противогрибковой активностью и другими). Одним из приоритетных направлений применений ПК является создание на их основе волокон и нитей с заданным (регулируемым) уровнем свойств. Волокна и нити, полученные на основе электропроводящих композитов, используются при производстве тканей для спецодежды и СИЗ (защиты от статического электричества, электромагнитных полей и пониженных температур в условиях Арктики и Крайнего Севера), изготовлении гибких греющих элементов для приборостроения, автомобильной и авиационной промышленности, агрохозяйства.

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

В исследовании выявлены закономерности изменения электропроводящих и механических свойств композитных волокон и плоских нитей, полученных на основе полипропиленовой матрицы, в зависимости от типа, формы и концентрации углеродных наноструктур, степени ориентационной вытяжки композитов. Показано, что с увеличением осевого отношения углеродных наночастиц порог протекания электрического тока смещается в сторону меньших концентраций. Также выявлено, что форма композитной нити и волокна оказывает влияние на формирование проводящего кластера. Создание электропроводящих композитных нитей возможно при более низких концентрациях, чем в случае экструзии плоских нитей (прямоугольного сечения). Показано, что введение смесового наполнителя позволяет сохранить электропроводность композитных волокон и нитей на исходном уровне при ориентационной вытяжке. Установлено, что ориентационная вытяжка в случае

наполнения моноуглеродными наноструктурами снижает электропроводность композитных волокон и плоских нитей, что вызвано разрывом проводящих цепочек в направлении вытяжки и не возможностью образования новых проводящих контактов, в то время как в случае наполнения смесью из сферических и анизометрических наночастиц электропроводность композитных нитей и волокон сохраняется на исходном уровне. Продемонстрировано, что наиболее высокие деформационно-прочностные характеристики композитных волокон и нитей, на основе полипропиленовой матрицы характерны при малом наполнении (до нескольких процентов) анизометричных частиц.

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

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

Р. Б. Моргунов

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

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

Российский квантовый центр, Сколково, Москва, Россия

ORCID: 0000-0002-4859-2733, SPIN-код: 9834-3340

Магнитные свойства графена и графеноподобных 2D-материалов

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

Во второй части лекции был представлен краткий обзор графеноподобных безуглеродных 2D-материалов, содержащих в кристаллической решетке атомы переходных металлов и проявляющих упорядочение спинов разных типов. Планируется рассмотреть практические применения однослойных магнитных структур в спинтронике.

В третьей части лекции были представлены оригинальные результаты, полученные нашей группой для монокристаллов и тонких (20 Å) флейков соединений CrSBr, CrCl₃, для которых нами были получены новые данные и выводы об их оптических, магнитных и механических свойствах. В частности, будет рассмотрена эксфолиация атомарных слоев в процессе наноинден-тирования, определения упругих модулей и энергии Ван-дер-Ваальсовой связи слоев для тонких образцов. Кроме того, рассмотрены магнитные релаксационные свойства этих соединений и их связь с электронной подсистемой. Полученные результаты позволяют судить о динамике доменов и нуклеации зародышей намагниченности, а также развивать простые и изящные методы

обнаружения сложных спиновых состояний и переходов, связанных с замораживанием спинов. Также подробно обсуждено влияние стехиометрии на магнетизм CrSBг.

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

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

А. Н. Образцов

МГУ имени М.В. Ломоносова, Физический факультет, Москва, Россия;
Балтийский федеральный университет им. И. Канта, Калининград, Россия
ORCID: 0000-0000-8017-0496, SPIN-код: 5961-3797

Общие принципы и практические методы получения углеродных пленок плазмо-химическим осаждением

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

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

Е. А. Образцова

Московский физико-технический институт, Долгопрудный, Московская область, Россия;
Федеральный научно-клинический центр Физико-химической медицины им. Лопухина
Федерального медико-биологического агентства, Москва, Россия;
Институт общей физики им. А.М. Прохорова РАН, Москва, Россия;
Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, Москва, Россия;
Балтийский федеральный университет им. И. Канта, Калининград, Россия
e.a.obraztsova@gmail.com, ORCID: 0000-0002-0086-0970

Е. В. Сорокина

Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, Москва, Россия

А. Г. Матвеева

Московский физико-технический институт, Долгопрудный, Московская область, Россия;
Федеральный научно-клинический центр Физико-химической медицины им. Лопухина
Федерального медико-биологического агентства, Москва, Россия

А. С. Богданова

Московский физико-технический институт, Долгопрудный, Московская область, Россия;
Федеральный научно-клинический центр Физико-химической медицины им. Лопухина
Федерального медико-биологического агентства, Москва, Россия

А. Р. Покровская

Московский физико-технический институт, Долгопрудный, Московская область, Россия
SPIN-код: 6083-6550

С. И. Бирюков

Московский физико-технический институт, Долгопрудный, Московская область, Россия

А. Е. Томская

Московский физико-технический институт, Долгопрудный, Московская область, Россия;
Институт общей физики им. А.М. Прохорова РАН, Москва, Россия

Д. В. Клинов

Московский физико-технический институт, Долгопрудный, Московская область, Россия;
Федеральный научно-клинический центр Физико-химической медицины им. Лопухина
Федерального медико-биологического агентства, Москва, Россия

Биосовместимые композиты с углеродными нанотрубками

Углеродные нанотрубки (далее — УНТ) обладают уникальным сочетанием прочности, высокой тепловой и электрической проводимости и большой удельной площадью поверхности. Эти свойства открывают множество возможностей для их применения. В биомедицине, однако, использование УНТ ограничено, так как чистые УНТ обладают токсичностью и обычно выпуска-

© Образцова Е. А., Матвеева А. Г., Богданова А. С., Покровская А. Р., Бирюков С. И., Томская А. Е., Клинов Д. В., 2026

ются в виде порошка, неудобного для работы в макромасштабе. Одним из перспективных решений является создание пленок или объемных структур из УНТ, однако прочность таких пленок ограничена из-за слабых π - π связей и сил Ван-дер-Ваальса между нанотрубками.

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

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

Работа выполнена при поддержке гранта РФФ №25-72-31032 «Получение наноструктурированных материалов и их суспензий» и проекта Министерства высшего образования и науки Российской Федерации FSMG-2023-0015 «Анализ токсичности и биосовместимости».

В. В. Павлик

Челябинский государственный университет, Челябинск, Россия;
Балтийский федеральный университет им. И. Канта, Калининград, Россия
vitaliy.pavlik@mail.ru, SPIN-код: 4137-4902

Структура и свойства автоинтеркалированных соединений на основе графитовых слоев

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

На первом этапе работы методом РМ7 был проведен расчет структуры двух типов одномерных (1D) АИ соединений, состоящих из взаимовложенных графитовых слоев α -, β_1 -, β_2 -, β_3 -, γ_1 - и γ_2 -разновидностей с двумя и четырьмя атомами в цепях. Соединения I и II типов были получены посредством взаимного проникновения слоев через центры наибольших пор вдоль первого и второго по малости векторов трансляции слоев соответственно. Далее по аналогии с наиболее устойчивыми 1D-соединениями были образованы трехмерные (3D) АИ фазы, структура и свойства которых были исследованы с помощью программного пакета Quantum ESPRESSO при использовании метода теории функционала электронной плотности (DFT) и нелокального функционала энергии vdW-DF.

Расчеты методом РМ7 показали, что наиболее устойчивыми 1D-соединениями являются АИ α -графит-1 и β_1 -графит-2 I типа, поскольку удельные разностные энергии этих соединений, рассчитанные по отношению к изолированным слоям, равны $-0,16$ и $-0,01$ ккал \times моль \times \AA^{-1} соответственно. Слои в структурах этих соединений имеют форму, близкую к плоской. Согласно DFT расчетам, кристаллические решетки 3D АИ фаз из α -графит-1 и β_1 -графит-2 (рис.) относятся к пространственным группам $I4/mcm$ и $Ibam$, а плотности этих фаз равны $1,28$ и $0,93$ г/см³ соответственно.

Молекулярно-динамическое (далее — МД) моделирование показало, что фаза из α -графит-1 термически устойчива до 550 К. Установлено, что 3D АИ α -графит-1 обладает отрицательной линейной сжимаемостью вдоль оси c , наименьшее значение которой ($K_c = -11,7$ ТПа⁻¹) наблюдается при минималь-

ном давлении. Объемный модуль упругости фазы равен 33,7 ГПа. Вдоль оси c в структуре АИ тетрагональной $I4/mst$ фазы имеются протяженные поры, через которые, согласно МД расчетам (при 400 К), могут проникать молекулы H_2 (рис., б). Идентифицировать АИ фазы на основе α -графина-1 и β 1-графина-2 возможно путем анализа порошковых рентгенограмм, полученных при использовании излучения K_α -серии хрома, в интервалах углов от 31 до 46° и от 17 до 20° соответственно.

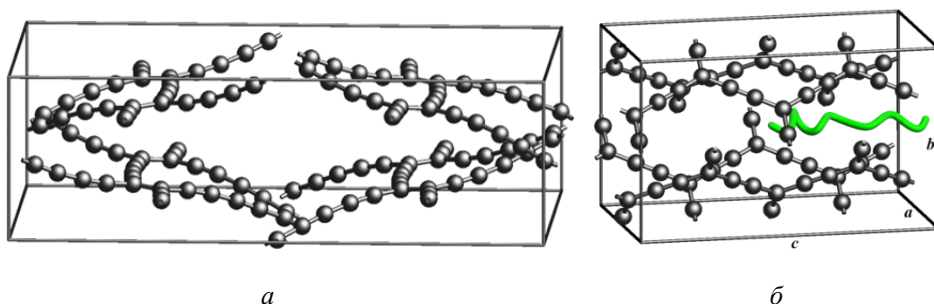


Рис. Элементарная ячейка АИ фазы из β 1-графина-2 (а); стандартная траектория движения центра масс молекулы H_2 в суперячейке АИ фазы на основе α -графина-1 (б)

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

Э. К. Погосян¹, И. О. Стасюк²

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

¹ edmondpoghosyan@yandex.ru

² SPIN-код: 9055-8690

Комплексные методы повышения энергетической эффективности и эксплуатационного ресурса лопастных насосных установок

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

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

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

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

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

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

Исследования выполнены при поддержке гранта РФФИ №25-72-31032 (<https://rscf.ru/project/25-72-31032>).

С. А. Рахвалов

Тюменский государственный университет, Тюмень, Россия

Ф. К. Шабиев

*Тюменский государственный университет, Тюмень, Россия;
Тюменский индустриальный университет, Тюмень, Россия
faridshab@mail.ru, ORCID: 0000-0003-0551-3836, SPIN-код: 3093-2362*

Ю. В. Пахаруков

*Тюменский индустриальный университет, Тюмень, Россия
ORCID: 0000-0002-3203-8893, SPIN-код: 3102-6911*

А. В. Шабиева

Тюменский медицинский университет, Тюмень, Россия

Р. Ф. Сафаргалиев

*Тюменский индустриальный университет, Тюмень, Россия
SPIN-код: 7815-6542*

Теплопроводящие свойства наноструктурированной пленки на основе графена и молекул углеводородов

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

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

© Рахвалов С. А., Шабиев Ф. К., Пахаруков Ю. В., Шабиева А. В., Сафаргалиев Р. Ф., 2026

В результате был получен кубик со стороной $a=20$ мм, изображенный на рисунке. Как можно видеть, слои расположены строго параллельно без инородных включений.

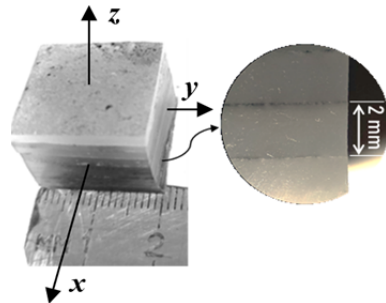


Рис. Куб из слоистого материала на основе наноструктурированной пленки многослойного графена и парафина

Измерение теплопроводности установило анизотропию теплопроводящих свойств. Оно проводилось вдоль осей x , y и z и составило значения

$$\alpha_x = (290.005 \pm 0.013) \text{ Вт}/(\text{м} \cdot \text{К}),$$

$$\alpha_y = (290.123 \pm 0.015) \text{ Вт}/(\text{м} \cdot \text{К}),$$

$$\alpha_z = (0.225 \pm 0.025) \text{ Вт}/(\text{м} \cdot \text{К}).$$

Очевидно, что пленка и материал, полученный на ее основе, обладает анизотропией теплопроводящих свойств.

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

Список литературы

1. Ariga K., Watanabe S., Mori T., Takeya J. Soft 2D nanoarchitectonics // NPG Asia Materials. 2018. Vol. 10 (4). P. 90—106.
2. Пахаруков Ю.В., Шабиев Ф.К., Сафаргалиев Р.Ф., Галунин Е.В. Иерархия процессов самоорганизации и самосборки на примере роста пленок на границе «углеводород-графеновый нанофлюид» // Журнал технической физики. 2025. Т. 95. С. 565—574.
3. Пахаруков Ю.В., Шабиев Ф.К., Мавринский В.В. и др. Формирования волновой структуры на поверхности графеновой пленки // Письма в журнал экспериментальной и теоретической физики. 2019. Т. 109 (9). С. 634—638.

А. М. Сабуров

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

В. А. Грешняков

Челябинский государственный университет, Челябинск, Россия;
Балтийский федеральный университет им. И. Канта, Калининград, Россия
ORCID: 0000-0002-2686-374X, SPIN-код: 2627-5388

Структура нанокристаллов из связанных зигзагообразных углеродных нанотрубок

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

При использовании методики получения новых соединений [2], полуэмпирического метода РМЗ и моделей, состоящих не менее чем из 1000 атомов, установлена структура двух фаз. Первая фаза — $T(6,0)b9$ — гибридная с 4-членными кольцами в областях соединения соседних УНТ (рис.).

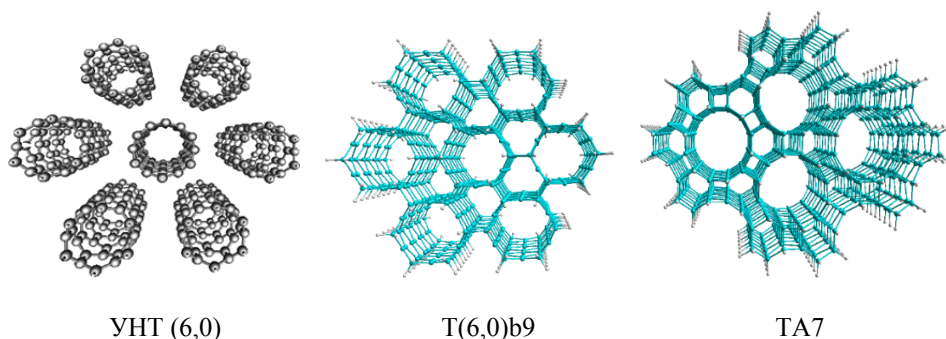


Рис. Фрагменты структуры жгута углеродных нанотрубок (6,0) и нанокристаллов из связанных нанотрубок

Нанокристаллы второй фазы состоят только из атомов в состояниях sp^3 -гибридизации (рис.) и близки по строению к алмазоподобной фазе LA7 из работы [3]. Оценочные плотности углеродной составляющей нанокристаллов фаз T(6,0)b9 и LA7 изменяются от 2,6 до 2,8 г/см³.

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

Список литературы

1. Wang Z. W., Zhao Y. S., Tait K. et al. A quenchable superhard carbon phase synthesized by cold compression of carbon nanotubes // Proc Natl Acad Sci USA. 2004. Vol. 101. P. 13699—13702.
2. Belenkov E. A., Greshnyakov V. A. Classification schemes of carbon phases and nanostructures // New Carbon Mater. 2013. Vol. 28. P. 273—283.
3. Беленков Е. А., Грешняков В. А. Классификация структурных разновидностей углерода // Физика твердого тела. 2015. Т. 57, №6. С. 1229—1239.

В. Г. Саламатов¹, В. В. Федотов²

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

¹ VGSalamatov@kantiana.ru, SPIN-код: 5248-8113

² SPIN-код: 2716-2675

Самораспространяющийся высокотемпературный синтез: разработка автономных источников тока и высокоэнергетического излучения

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

Проведены экспериментальные исследования, направленные на изучение возможности применения лент, изготовленных методом холодной прокатки порошковых смесей $Ti + 1,7B$ и $Fe_3O_4 + 1,5Ti$, в качестве ячеек резервных источников тока (батарей высокотемпературных гальванических элементов) для питания различных приборов и устройств в экстремальных условиях эксплуатации. В результате экспериментов было установлено, что ячейки-ленты толщиной 200 мкм демонстрируют способность генерировать электрическое напряжение в процессе горения в магнитном поле (0,5 Тл), превышающее 1,5—2,5 В. Длительность генерирования электрического тока составила более 10 с. Полученные характеристики превосходят показатели применяемых на данный момент батарей конструкций типа: $Zr/CuO-LiF/CaF_2/MgF_2-Zr/CuO$. Прямое преобразование химической энергии энергетических конденсированных систем в электрическую энергию в режиме горения многослойной конденсированной энергетической системы является новым направлением высокотемпературной электрохимии.

Экспериментально исследовано высокотемпературное горение порошковых смесей $MoO_3-1,5Al$, $Ti-2B$ и реакции ламинатных композитов $Ti-2B$, $Ti-C$, $5Ti-3Si$. Методом фотографической фотометрии установлено, что эмиссионный спектр исследуемых процессов простирается вплоть до мягкого рентгеновского диапазона длин волн. Рентгеновское излучение детектировали с использованием фотометрического пакета, состоящего из фотопленки RAR2497 и окружающих защитных слоев (рис.), а также с использованием сцинтилляционного детектора SCSD-4.01 (NaI(Tl)). Обсужден вероятный механизм возбуждения рентгеновского излучения. Показано, что представленные результаты демонстрируют высокий уровень новизны и актуальности, что требует проведения дальнейших исследований в данной области.

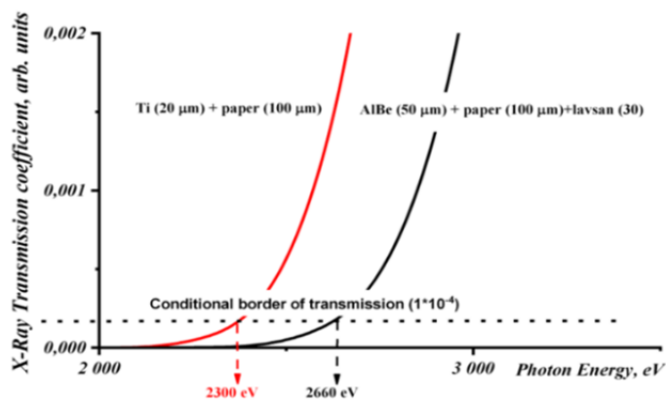


Рис. Рассчитанные характеристики прохождения фотонов через защитные экраны, использованные в экспериментах [1]

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

Список литературы

1. Henke B. L., Gullikson E. M., Davis J. C. X-Ray Interactions: Photoabsorption, Scattering, Transmission, and Reflection at $E=50\text{—}30,000$ eV, $Z=1\text{—}92$ // Atomic Data and Nuclear Data Tables. 1993. Vol. 54 (2). P. 181—342.

Д. Д. Саляхова¹, В. В. Мавринский²

Магнитогорский государственный технический университет им. Г. И. Носова, Магнитогорск, Россия

¹ SPIN-код: 1168-5883

² SPIN-код: 1563-6840

Гибридные sp - sp^2 слоевые соединения, сформированные на основе графена L_{4-6-8}

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

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

В качестве исходного для теоретического построения графиновых слоев, были выбраны шесть структурных разновидностей 4-6-8 графена (L_{4-6-8a} , L_{4-6-8b} , L_{4-6-8c} , L_{4-6-8d} , L_{4-6-8e} , L_{4-6-8f}). Анализ показал, что на основе всех шести полиморфных модификаций графена L_{4-6-8} возможно формирование 51 графиновой структуры. Методом DFT-GGA была выполнена геометрическая оптимизация всех построенных графинов. При геометрической оптимизации часть графиновых слоев оказалась неустойчивой, и их структура трансформировалась в sp - sp^2 с уменьшением доли sp -гибридизированных атомов по отношению к исходной. Элементарные ячейки всех L_{4-6-8a} -, L_{4-6-8c} -, L_{4-6-8d} - и L_{4-6-8f} -графин являются прямоугольными. Для слоев L_{4-6-8b} - и L_{4-6-8e} -графина элементарные ячейки могут быть косоугольными и прямоугольными. Диапазон длин векторов элементарных трансляций варьируется от 4,2 до 29 Å, а углы между векторами для косоугольных ячеек — от 95,2° до 160,8°. Для всех рассчитанных слоев графина удельная энергия связей, приходящаяся на один атом углерода, превышает удельную энергию для чистого графена, на основе которого они были построены. Таким образом, увеличение sp -гибридизиро-

ванных атомов приводит к уменьшению устойчивости графеновых слоев по сравнению с чистым графеном L_{4-6-8} . Наименьшее отличие удельной энергии графенового слоя от удельной энергии базового слоя графена наблюдается для $\gamma 1$ -структуры, у которой только одна из трех связей для каждого sp^2 -гибридизированного атома заменена на карбиновую цепочку. Она имеет наибольшее значение энергии сублимации, поэтому должна быть наиболее устойчивой. Наименьшей удельной энергией связей обладает α - L_{4-6-8b} -графин.

Для части геометрически оптимизированных слоев были рассчитаны зонная структура и плотности электронных состояний. Установлено, что слои α - L_{4-6-8a} , $\gamma 1$ - L_{4-6-8a} и $\beta 2$ - L_{4-6-8b} должны быть узкозонными полупроводниками, а слои $\beta 1$ - L_{4-6-8a} , α - L_{4-6-8b} , $\beta 3$ - L_{4-6-8b} , $\beta 4$ - L_{4-6-8b} , $\beta 1$ - L_{4-6-8c} , $\beta 1$ - L_{4-6-8d} , $\beta 3$ - L_{4-6-8f} должны обладать проводящими свойствами.

Список литературы

1. *Belenkov M.E., Kochengin A.E., Chernov V.M., Belenkov E.A.* Graphene polymorphs // *Journal of Physics: Conference Series*. 2019. Vol. 1399. P. 022024.
2. *Мавринский В. В., Беленков Е. А.* Графиновые слои, сформированные на основе слоев 5-7 графена // *Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов*. 2020. Вып. 12. С. 446.
3. *Belenkov E.A., Mavrinskii V.V.* Structural types of graphyne layers formed on the basis of 4-6-12 graphene // *Journal of Physics: Conference Series*. 2020. Vol. 1431. P. 012.

Ф. М. Самборский

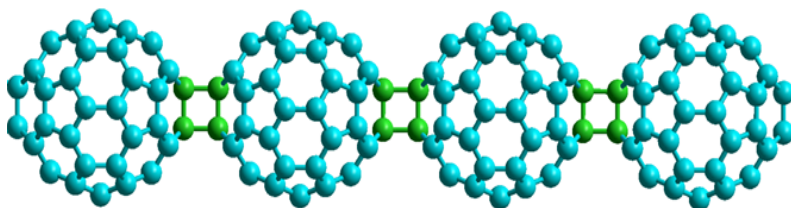
Челябинский государственный университет, Челябинск, Россия
fedor.samborsky@yandex.ru

В. А. Грешняков

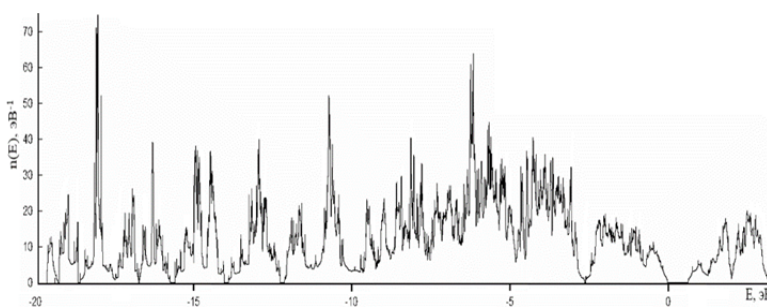
Челябинский государственный университет, Челябинск, Россия;
Балтийский федеральный университет им. И. Канта, Калининград, Россия
ORCID: 0000-0002-2686-374X, SPIN-код: 2627-5388

Трехмерно полимеризованный фуллерит C_{60} низкой плотности

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



a



б

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

Модельное получение структуры с помощью сшивки предшественников выполнено на основе методики из работы [2] при использовании метода теории функционала плотности в обобщенном градиентном приближении (DFT-GGA), апробированного в работе [3]. Установлена возможность существования трехмерной фазы из связанных цепочек полимеризованных фуллеренов C₆₀ (рис., а) с 20%-ной долей sp³ гибридизированных атомов. Эта фаза характеризуется кубической симметрией Pm3 ($a=9,10 \text{ \AA}$) и плотностью 1,59 г/см³. Полная энергия полимеризованного кубического фуллерита выше энергии алмаза только на 0,25 эВ/атом. Расчет электронной структуры Pm3 фазы показал, что полимеризованный фуллерит должен быть полупроводником, ширина запрещенной зоны которого более чем на 80% меньше соответствующей величины для алмаза (рис., б).

Список литературы

1. Laranjeira J., Marques L., Melle-Franco M. et al. Clathrate structure of polymerized fullerite C₆₀ // Carbon. 2022. Vol. 194. P. 297—302.
2. Беленков Е. А., Грешняков В. А. Классификация структурных разновидностей углерода // Физика твердого тела. 2013. Т. 55. С. 1640—1650.
3. Грешняков В. А. Первопринципное исследование L₄-, L₃₋₆- и L₃₋₄₋₆-алмазоподобных трубчатых наноструктур // Журнал структурной химии. 2023. Т. 64. С. 106790.

М. Л. Смирнов

*Балтийский федеральный университет им. И. Канта, Калининград, Россия
smirnov.mark2015@yandex.ru, SPIN-код: 7045-1472*

Изучение влияния наночастиц золота на коэффициент диффузии аминокислоты L-триптофана в водном растворе методом диффузионно-упорядоченной ЯМР-спектроскопии

Коэффициент диффузии (D-коэффициент) является одной из важнейших характеристик молекулярного движения, которая позволяет получить представление о мобильности молекулы в растворе, а также служит дополнительным фактором для подтверждения конформационных изменений молекулы. Исследованию коэффициента диффузии аминокислот посвящен не один десяток работ [1; 2]. Стоит отметить, что для его изучения используются как расчетные методы, так и экспериментальные, в том числе метод диффузионно-упорядоченной ЯМР-спектроскопии (NMR DOSY).

Целью нашей работы было изучение влияния наночастиц золота различной геометрической формы на коэффициент диффузии ароматической аминокислоты L-триптофана в водном растворе методом диффузионно-упорядоченной ЯМР-спектроскопии.

Ароматическая аминокислота L-триптофан была растворена в воде с концентрацией 10^{-3} моль/л. К 120 мкл водного раствора триптофана было добавлено 48 мкл раствора, содержащего наночастицы золота в форме стержней (rods) и звезд (stars). Также был исследован образец триптофана с добавлением 48 мкл стабилизатора золотых наночастиц — цетилтриметиламмония бромида (СТАВ).

Двумерные спектры NMR DOSY были получены на ЯМР-спектрометре высокого разрешения Varian 400 MHz с величиной постоянного магнитного поля $B=9,04$ Тл. Для проведения диффузионно-упорядоченного ЯМР-эксперимента была использована импульсная последовательность Doneshot. Эксперимент 2D-DOSY был выполнен с подавлением интенсивного сигнала воды со следующими параметрами: диффузионная задержка — 50,0 ms, релаксационная задержка — 1 с, спектральная ширина — 16 ppm, количество накоплений — 512. Значения коэффициента диффузии были рассчитаны с помощью ПО «VNMRJ».

Результаты эксперимента по измерению коэффициента диффузии представлены в таблице. Коэффициент диффузии был рассчитан для протона H21, который располагается в индольном кольце молекулы триптофана в непосредственной близости от NH группы.

Диазоны химического сдвига и коэффициента диффузии для протона Н21, находящегося в гетероциклическом фрагменте молекулы триптофана

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

По данным, представленным в таблице, отчетливо заметна тенденция, что добавление золотых наночастиц обоих типов приводит к уменьшению коэффициента диффузии с $6,3—6,9 \times 10^{-10}$ м²/с до $5,5—6,0 \times 10^{-10}$ м²/с. Стоит отметить, что присутствие стабилизатора НЧ приводит к еще более значительному уменьшению коэффициента диффузии до $5,2—5,5 \times 10^{-10}$ м²/с.

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

Список литературы

1. Zhang H., Yin C., Jiang Y., van der Spoel D. Force Field Benchmark of Amino Acids: I. Hydration and Diffusion in Different Water Models // J Chem Inf Model. 2018. Vol. 58 (5). P. 1037—1052.
2. Smirnov M., Gamov G., Zyubin. A. et al. Interaction of gold and platinum nanoparticles with L-tyrosine in aqueous solution: Conformational and dynamic changes // Journal of Molecular Liquids. 2025. Vol. 420. P. 126822.

А. Д. Соковнин

Челябинский государственный университет, Челябинск, Россия;
aleksej.sokovnin@yandex.ru

В. А. Грешняков

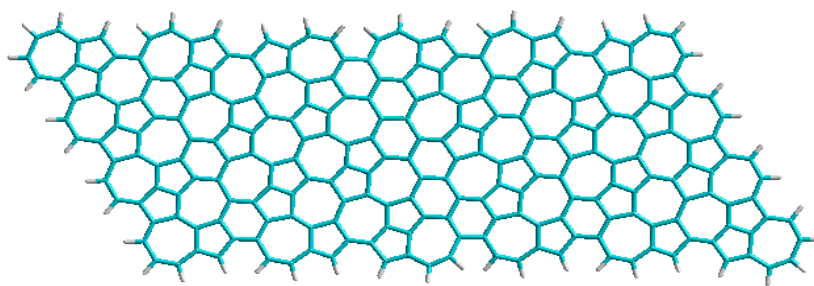
Челябинский государственный университет, Россия, Челябинск, Россия;
Балтийский федеральный университет им. И. Канта, Калининград, Россия
ORCID: 0000-0002-2686-374X, SPIN-код: 2627-5388

Расчет структуры графеновых лент на основе полиазулена и полипенталена

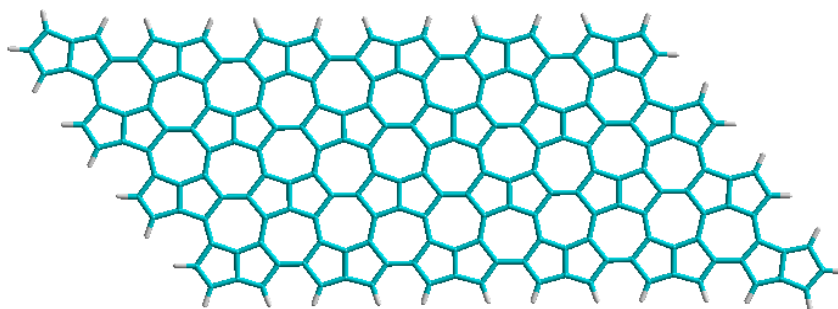
В современном мире графеновые слои занимают особое положение, являясь объектом интенсивных исследований и перспективных разработок. Уникальные физические, химические и механические свойства графена, такие как высокая электропроводность, механическая прочность и большая площадь поверхности, открывают широкие возможности для его применения в различных областях от электроники до медицины. Поскольку графен имеет множество полиморфных разновидностей, то большой интерес представляет поиск графеновых лент новых структурных разновидностей. Поэтому в данном исследовании выполнен анализ и расчет структуры графеновых лент, формирующихся на основе молекул азулена и пенталена.

Исследование возможной структуры графеновых лент было выполнено в результате перебора способов ковалентного связывания исходных молекул азулена или пенталена. Для расчета финальной структуры построенных лент был использован полуэмпирический метод РМЗ. Установлена возможность существования двух типов наиболее устойчивых графеновых лент (рис.).

Изученные ленты с шириной более 13,5 Å являются плоскими. В полипенталеновой ленте имеются звенья только из 5- и 7-угольников, а в полиазуленовой ленте — 5-, 6- и 7-угольники. В большой полиазуленовой ленте можно выделить моноклинную ячейку из 30 атомов с параметрами $a = 9,28$ Å, $b = 20,3$ Å и $\alpha = 60,2^\circ$. Длины С-С связей в этой ленте изменяются от 1,363 до 1,499 Å, величины углов между связями — от 103,1 до 142,6°. Структура графеновой ленты на основе пенталена близка к структуре ранее изученного слоя графена, называемого пентагептитом или L_{5-7a} , имеющего, согласно расчетам методом РМЗ, ромбическую ячейку из 16 атомов с параметрами $a = 7,48$ Å, $b = 5,81$ Å. В полипенталеновой ленте шириной $\sim 14,4$ Å длины С-С связей изменяются от 1,354 до 1,505 Å, а величины углов между этими связями — от 104,3 до 138,4°. Таким образом, в работе была предсказана одна новая модификация графеновой ленты.



a



б

Рис. Фрагменты полиазуленовой (*a*) и полипенталеновой (*б*) графеновых лент

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

А. С. Трунин

Балтийский федеральный университет им. И. Канта, Калининград, Россия
eletednyas@live.ru, SPIN-код: 7880-3323

Локализованные рациональные решения (1 + 2) нелинейного уравнения Клейна — Гордона

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

И. В. Тулупов¹, А. Ю. Исаев², Ф. К. Шабиев³, Е. В. Галунин, Г. Н. Шигабаева⁴

Тюменский государственный университет, Тюмень, Россия

¹ tulupovila958@gmail.com

² SPIN-код: 6297-2862

³ ORCID: 0000-0003-0551-3836, SPIN-код: 3093-2362

⁴ SPIN-код: 9933-6376

Исследование сорбции ионов Pb²⁺ из водных сред на оригинальных и функционализированных углеродных нанотрубках «Таунит-М»

Наноматериалы, такие как углеродные нанотрубки (далее — УНТ), графен, оксид графена и др., являются перспективными сорбентами для удаления различных токсичных загрязнителей из водных сред. Введение в их структуру органических лигандов, таких как терпиридины или фенантролины, может повысить эффективность очистки водных систем от вышеупомянутых загрязнителей. В этой связи целью данного исследования стало сравнительное исследование механизма сорбции неорганического поллютанта — Pb(II) — на УНТ «Таунит-М» (ООО «ЗАВКОМ-Инжиниринг», Тамбов, РФ) в оригинальной и модифицированной органическими лигандами (фенантролиной) форме из водных растворов.

Определенное количество образцов УНТ приводилось в контакт с водными растворами, содержащими Pb(II), путем встряхивания на ротаторе Multi Bio RS-24 (BioSan Ltd., Рига, Латвия) в течение некоторых интервалов времени t (мин). Концентрацию раствора до и после сорбции, необходимую для вычисления сорбционной емкости материала Q (мг/г) определяли на атомно-абсорбционном спектрофотометре ContrAA 700 (Analytic Jena GmbH., Йена, Германия). На рисунке показаны экспериментальные кривые зависимости сорбционной емкости модифицированных, функционализированных (далее — МУНТ), и немодифицированных, оригинальных (далее — НМУНТ), УНТ. Из них видно, что выход на плато (то есть момент наступления сорбционного равновесия в системе) происходит в течение примерно 10 и 5 мин для НМУНТ и МУНТ соответственно. При этом значения Q образцов НМУНТ оказались выше, чем для МУНТ, что может говорить о перекрывании органическими лигандами некоторых активных сорбционных центров на поверхности УНТ.

Для подтверждения данной гипотезы, решения проблемы перекрывания поверхностных центров и с целью более полного понимания механизма сорбции выбранного загрязнителя на поверхности сорбентов в дальнейшем планируется проведение анализа зависимости сорбционной емкости материала от концентрации поллютанта, а также исследование поверхности УНТ методами СЭМ, ЭДС и др.

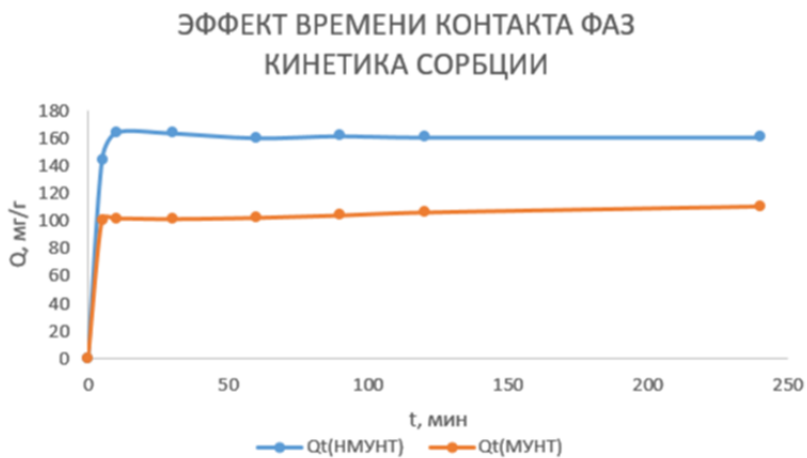


Рис. Экспериментальные кривые зависимости сорбционной емкости МУНТ и НМУНТ от времени контакта фаз

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда №25-23-00318 (<https://rscf.ru/project/25-23-00318/>).

А. Тюрина

*Институт катализа им. Г.К. Борескова СО РАН, Новосибирск, Россия
a.tyurina1@alumni.nsu.ru*

Синтез и исследование высокоактивных никелевых катализаторов метанирования CO_2 на основе углеродных нанотрубок

Борьба с глобальным потеплением требует технологий утилизации CO_2 . Одно из перспективных направлений — каталитическое превращение CO_2 в метан (реакция Сабатье) в рамках концепции CCUS (улавливание, использование и хранение углерода). Эффективность процесса определяется катализатором, где ключевую роль играют активная фаза и носитель.

Цель исследования — разработка и сравнительное изучение каталитических свойств Ni-катализаторов на многослойных углеродных нанотрубках (далее — МУНТ) в реакции метанирования CO_2 .

Методом пропитки синтезированы две серии катализаторов на основе МУНТ:

- 1) с варьированием содержания Ni (6—30 мас. %);
- 2) из разных прекурсоров (нитрат и ацетат никеля).

Фактическое содержание никеля в образцах контролировали методом рентгенофлуоресцентного анализа. Каталитическую активность оценивали в проточном реакторе, морфологию — методами электронной микроскопии.

Установлена зависимость активности от содержания Ni. При росте концентрации с 6 до 20 мас. % конверсия CO_2 существенно возрастает. Дальнейшее увеличение до 30 мас. % не дает значимого эффекта, что указывает на достижение оптимальной загрузки металла.

Ключевой результат — катализатор с ~20 мас. % Ni на МУНТ превосходит по активности промышленный аналог НИАП-07 (25,7 мас. % Ni на оксидном носителе).

Природа прекурсора влияет на активность: образцы из $\text{Ni}(\text{NO}_3)_2$ активнее образцов из $\text{Ni}(\text{CH}_3\text{COO})_2$. Показано, что это связано с более высокой дисперсностью никелевых частиц (4—20 нм) в первом случае и возможным зауглероживанием во втором.

По результатам исследования можно сделать следующие выводы. МУНТ являются высокоэффективным носителем для Ni-катализаторов метанирования CO_2 . Определена оптимальная загрузка никеля — ~20 мас. %, что обеспечивает высокую активность при рациональном использовании металла. Нитрат никеля — более предпочтительный прекурсор для синтеза по сравнению с ацетатом, так как позволяет получать более дисперсные и активные каталитические системы.

Полученные катализаторы представляют интерес для создания технологий преобразования CO_2 в энергоноситель (метан), способствуя решению задач декарбонизации и циклической экономики.

**Ю. В. Федосеева¹, Е. В. Лисица, А. А. Ворфоломеева²
А. Д. Панфилова, Л. Г. Булушева³, А. В. Окотруб⁴**

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

¹ fedoseeva@niic.nsc.ru, ORCID: 0000-0003-1681-1708, SPIN-код: 8340-1499

² SPIN-код: 6780-0517

³ SPIN-код: 7251-8758

⁴ SPIN-код: 7408-8031

Синтез и химическая модификация мезопористых углеродных материалов для применения в качестве электродов аккумуляторов и конденсаторов

Для развития электротранспорта необходимо разработать новые энергоёмкие, мощные и дешёвые устройства накопления электрической энергии, способные работать длительное время в условиях холодного климата. Для решения этой задачи необходимо разработать ёмкие и стабильно работающие электродные материалы. Нанопористые углеродные материалы представляют собой трёхмерные прочные каркасы, состоящие из тонких графеноподобных слоёв. Они обладают уникальной пористой структурой, развитой поверхностью, высокой химической и термической стабильностью, а также хорошей электрической проводимостью. Благодаря данным свойствам пористые углеродные материалы представляют большой практический интерес для их применения в качестве материалов электродов в суперконденсаторах, включая гибридные, и анодов в литий- и натрий-ионных аккумуляторах.

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

Были разработаны новые методики химической модификации пористого углеродного материала, а именно азотирование, бромирование и хлорирование. В работе особое внимание было уделено исследованию морфологии, состава, строения и поверхности углеродных материалов набором современных физико-химических методов, включая методы электронной спектроскопии,

низкотемпературной адсорбции азота, рамановской спектроскопии, инфракрасной спектроскопии, рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии и ультрамягкой рентгеновской спектроскопии эмиссии и поглощения. Для интерпретации спектральных данных и объяснения электрохимических наблюдений применялись результаты квантово-химического моделирования. Электрохимическое тестирование образцов было проведено в качестве электродов суперконденсаторов, анодов литий- и натрий-ионных аккумуляторов, катодов литий- и натрий-ионных конденсаторов при комнатных и пониженных температурах до -20°C . Для бромированного азотсодержащего углеродного материала были достигнуты наиболее высокие значения удельной емкости в натрий-ионных аккумуляторах 1101—612 мАч/г при температуре 25°C и 649—312 мАч/г при температуре -20° , при плотностях тока 0,1—2 А/г. Была установлена роль азотсодержащих и галогенсодержащих функциональных групп на поверхности углеродных материалов в накоплении катионов щелочных металлов в аккумуляторах и ионов электролитов в конденсаторах.

**Ю. В. Федосеева¹, Д. В. Городецкий², Л. Г. Булушева³
А. В. Окотруб⁴, О. В. Седельникова⁵**

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

¹ fedoseeva@niic.nsc.ru, ORCID: 0000-0003-1681-1708, SPIN-код: 8340-1499

² SPIN-код: 1997-8992

³ SPIN-код: 7251-8758

⁴ SPIN-код: 7408-8031

⁵ SPIN-код: 5293-2460

Влияние поверхностных состояний датчика из алмазной пленки и графитовых электродов на его фотоотклик на рентгеновское излучение

Рентгеновские лучи нашли широкое применение в различных сферах: от медицинской визуализации до промышленной дефектоскопии, анализа кристаллической структуры и проверки безопасности. Однако эффективность их использования в этих областях напрямую зависит от качества рентгеновских детекторов. Поэтому существует острая необходимость в создании высокочувствительных и быстродействующих детекторов рентгеновского излучения, которые должны обладать высокой радиационной стойкостью и способностью работать при высоких температурах. Алмаз состоит из атомов углерода в sp^3 гибридизации и благодаря его строению обладает уникальными свойствами, которые делают незаменимым его использование в различных технологиях. У алмаза широкая запрещенная зона, высокая подвижность и короткий срок жизни носителей заряда, а также невероятная устойчивость к воздействию агрессивных сред. Поэтому он является прозрачным в видимом диапазоне и может использоваться для изготовления детекторов на электромагнитное излучение в ультрафиолетовой и рентгеновской области.

В данной работе детекторы изготавливались из свободных поликристаллических алмазных пленок, полученных методом плазмо-стимулированного химического осаждения (PE CVD) из смеси водорода и пентана при активации микроволновым разрядом. При облучении поверхности алмазной пленки мощным импульсным ультрафиолетовым лазером на воздухе происходит травление поверхности алмазной пленки с образованием каналов, покрытых низкоразмерным графитоподобным слоем высокой электропроводности. Продемонстрирована возможность изготовления на поверхности алмазных пленок встречных параллельных графитовых электродов с целью изготовления датчика рентгеновского излучения. Морфология, состав, а также электронное строение алмазных пленок и графитоподобных электродов изучались методами сканирующей электронной микроскопии, рамановской спектроскопии и рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии. Постоянное

напряжение смещения величиной до нескольких сотен вольт подавалось на углеродные электроды — треки, образовавшиеся в результате обработки лазером. Между электродами по поверхностному слою необработанных лазером участков алмазной пленки протекал ток, который регистрировался с использованием амперметра. Величина темнового тока была около 5 нА. При облучении рентгеновскими фотонами в алмазе образуются электрон-дырочные пары, которые могут быть обнаружены при приложении напряжения смещения. В присутствии электрического поля в алмазе происходит локальное смещение электронов и дырок и их концентрация, что приводит к увеличению тока, протекающего между электродами датчика. Проведено измерение фототока при облучении лабораторной рентгеновской трубкой с медным анодом и вольфрамовым катодом при напряжении до 8000 В. Обнаружено увеличение фотоотклика с ростом энергии рентгеновских фотонов. Термическая обработка датчика в восстановительной атмосфере аммиака или водорода привела к увеличению фотоотклика на рентгеновское излучение и работе датчика при меньших напряжениях.

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

**Е. Г. Чупахин¹, Я. А. Масютин², А. В. Шевелюхина³
Т. К. Капитанова, Т. О. Кулигина, В. В. Ларина⁴**

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

¹ echupakhin@kantiana.ru, ORCID: 0000-0001-5284-4748, SPIN-код: 8351-6096

² ORCID: 0000-0003-4347-3425, SPIN-код: 2467-9765

³ ORCID: 0000-0002-0146-315X, SPIN-код: 3899-0758

⁴ ORCID: 0000-0003-2012-2438, SPIN-код: 4706-1074

Углеродные материалы для анодов: от графита до метаматериалов

Функциональные метаматериалы представляют собой искусственно спроектированные структуры со свойствами, не встречающимися в природе [1]. В области проектирования анодных материалов на основе углерода можно говорить об их эволюции.

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

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

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

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

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

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

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

© Чупахин Е. Г., Масютин Я. А., Шевелюхина А. В., Капитанова Т. К., Кулигина Т. О., Ларина В. В., 2026

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

Список литературы

1. Sun M., Qiu Z., Chen Q. *et al.* A Mechanical Metamaterial for Energy Absorption using Carbon Fiber Composite // J Mech Sci. 2025. Vol. 295. P. 110282. doi: 10.1016/j.ijmecsci.2025.110282.

Ф. К. Шабиев

*Тюменский государственный университет, Тюмень, Россия;
Тюменский индустриальный университет, Тюмень, Россия
faridshab@mail.ru, ORCID: 0000-0003-0551-3836, SPIN-код: 3093-2362*

Ю. В. Пахаруков

*Тюменский индустриальный университет, Тюмень, Россия
ORCID: 0000-0002-3203-8893, SPIN-код: 3102-6911*

С. А. Васильев

*Новосибирский государственный университет, Новосибирск, Россия
SPIN-код: 8189-5239*

Б. С. Ездин

*Новосибирский государственный университет, Новосибирск, Россия
SPIN-код: 3613-8309*

Р. Ф. Сафаргалиев

*Тюменский индустриальный университет, Тюмень, Россия
SPIN-код: 7815-6542*

Самоорганизация наночастиц углерода, как процесс управляемого роста наноструктурированных материалов

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

В данной работе комплексно изучалось взаимодействие графеновых наночастиц и углеводородов на межфазной границе с целью понять, как формируются упорядоченные кристаллические наноструктуры. С помощью оригинальной установки предложен новый метод выращивания наноструктурированной пленки из молекул углеводородов и графеновых нанопластин на границе раздела «углеводород — графеносодержащая наножидкость (далее — ГНЖ) на водной основе». С использованием методов рентгеноструктурного анализа и молекулярно-механического моделирования установлена структура

пленки. Исследование показало, что механизм роста пленки связан с процессами самоорганизации графеновых наночастиц на границе «ГНЖ — углеводород». Установлено, что управляющим параметром режимов роста пленок выступает теплоотвод от границы раздела и температура системы. В результате было определено три режима роста пленок, приводящих к различным структурам. При быстром теплоотводе наблюдается медленный рост пленки с образованием фрактальных структур типа множества Мандельброта. При медленном теплоотводе наблюдается быстрый рост пленки с формированием сплошной однородной структуры, не являющейся фракталом. При увеличении начальной температуры системы наблюдается взрывной рост с образованием аморфной пленки. Используя данные изучения механизма наноструктурирования на границе «ГНЖ — углеводород», была разработана методика управляемого роста пленок с заведомо известной структурой (рис.).



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

Исследование выполнено за счет гранта РФФ №25-71-00047.

Список литературы

1. Пахаруков Ю. В., Шабиев Ф. К., Сафаргалиев Р. Ф., Галунин Е. В. Иерархия процессов самоорганизации и самосборки на примере роста пленок на границе «углеводород — графеновый нанофлюид» // Журнал технической физики. 2025. Т. 95. С. 565—574.
2. Ariga K., Watanabe S., Mori T., Takeya J. Soft 2D nanoarchitectonics // NPG Asia Materials. 2018. Vol. 10 (4). P. 90—106.

А. В. Шабиева

Тюменский медицинский университет, Тюмень, Россия

Ю. В. Пахаруков

Тюменский индустриальный университет, Тюмень, Россия
ORCID: 0000-0002-3203-8893, SPIN-код: 3102-6911

Р. Ф. Сафаргалиев

Тюменский индустриальный университет, Тюмень, Россия
SPIN-код: 7815-6542

Ф. К. Шабиев

Тюменский государственный университет, Тюмень, Россия;
Тюменский индустриальный университет, Тюмень, Россия
faridshab@mail.ru, ORCID: 0000-0003-0551-3836, SPIN-код: 3093-2362

Гофрированные поверхности для создания упорядоченных подложек с целью сепарации бактерий разного размера

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

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

В результате эксперимента были получены подложки с различной глубиной и расстоянием между ребрами. На рисунке, *а* получена структура подложки в виде впадин, на рисунке, *б* — в виде горбов.

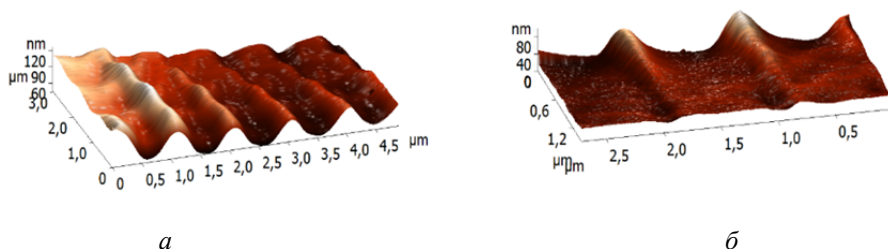


Рис. АСМ изображение поверхности подложки на парафиновой основе покрытых пленкой изоструктурированных многослойных графеновых чашек: *a* — в виде впадин; *б* — в виде горбов

Данная технология позволяет создавать подложки со сложной геометрией поверхности.

Исследование выполнено за счет гранта РФФ № 25-71-00047.

Список литературы

1. Баимова Ю. А., Мулюков Р. Р. Графен, нанотрубки и другие углеродные наноструктуры. М., 2018.
2. Jayaprakash N., Elumalai K., Manickam S. et al. Carbon nanomaterials: Revolutionizing biomedical applications with promising potential // Nano Materials Science. 2024. URL: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S2589965124001673> (дата обращения: 17.10.2025).
3. Darini R., Ahari H., Khosrojerdi A. et al. Antimicrobial properties of Graphene sheets embedded with Titanium Oxide and Calcium Oxide nanoparticles for industrial wastewater treatment // Scientific Reports. 2025. Vol. 15 (1). P. 1007.
4. Пахаруков Ю. В., Шабиев Ф. К., Мавринский В. В. и др. Формирования волновой структуры на поверхности графеновой пленки // Письма в журнал экспериментальной и теоретической физики. 2019. Т. 109 (9). С. 634—638.
5. Пахаруков Ю. В., Шабиев Ф. К., Сафаргалиев Р. Ф. Образование наноструктурированной пленки на границе «углеводород — графеновый наноплюид» // Вестник ТюмГУ. Физико-математическое моделирование. Нефть, газ, энергетика. 2023. Т. 9. (2). С. 23—38.

А. В. Шевелюхина¹, Т. К. Капитанова, Т. О. Кулигина, В. В. Ларина²

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

¹ avshevelyukhina@kantiana.ru, ORCID: 0000-0002-0146-315X, SPIN-код: 3899-0758

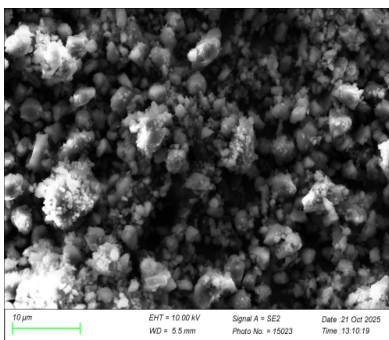
² ORCID: 0000-0003-2012-2438, SPIN-код: 4706-1074

Влияние различных катализаторов на карбонизацию целлюлозы

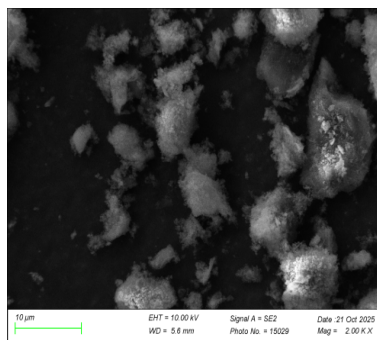
Мезопористые углеродные материалы на основе целлюлозы представляют интерес в качестве анодов ионных аккумуляторов благодаря их устойчивости и высокой пористости. Гидротермальная карбонизация (далее — ГТК) целлюлозы ограничена низким выходом углерода и неконтролируемой пористостью, что затрудняет получение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

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

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



a



б

Рис. Изображение СЭМ материала, полученного с катализатором:
a — NaOH; *б* — ZnCl₂

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

Список литературы

1. *Zhu X., Liu Y., Qian F. et al.* Role of Hydrochar Properties on the Porosity of Hydrochar-based Porous Carbon for Their Sustainable Application // ACS Sustain. Chem. Eng. 2015. Vol. 3. P. 833—840.
2. *Neme I., Gonfa G., Masi C.* Activated carbon from biomass precursors using phosphoric acid: A review // Heliyon. 2022. Vol. 8. P. e11940.

А. В. Шульгин¹, О. О. Молоканова, О. А. Молоканова²

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

¹ ashulgin@kantina.ru, SPIN-код: 5989-3614

² ORCID: 0000-0002-1057-598, SPIN-код: 6284-8818

Прогнозирование степени фильерной вытяжки волоконных композитов с углеродными нанотрубками

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

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

В качестве модельной полимерной матрицы в работе использовался полиамид марок ПА6 Волгамид (ПАО «КуйбышевАзот», Россия) и ПА6БЛ Гродномид (ОАО «Гродно Азот», Беларусь). В качестве наполнителя использовались одностенные углеродные нанотрубки в виде мастербатча марки ОУНТ УДО 827 серия Б (ООО «Универсальные добавки», Россия).

В работе решались следующие задачи:

— экспериментальное исследование влияния малых концентраций углеродных нанотрубок (до 10 масс.%) на реологическое поведение полиамидных волокон в процессе переработки в камере лабораторного двухшнекового экструдера;

— установление зависимости между скоростью приемно-тянущего устройства и достигаемой кратностью фильерной вытяжки для различных композиций;

— разработка гибридных математических моделей, описывающих зависимость фильерной вытяжки волоконных композитов от концентрации углеродных нанотрубок;

— верификация прогнозирования моделей и оптимизация состава композитов с применением алгоритма машинного обучения XGBoost.

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

А. С. Яковлев¹, К. П. Катин²

Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ», Москва, Россия

¹ alexand.2001@mail.ru

² KPKatin@mephi.ru, SPIN-код: 3716-8868

Двумерные литиевые материалы для хранения водорода: моделирование из первых принципов

В настоящий момент существует запрос на поиск и внедрение новых источников энергии, превосходящих по характеристикам такие традиционные источники, как уголь, нефть и газ [1]. Одним из перспективных энергоносителей является водород, обладающий рядом преимуществ: высокая энергоемкость, экологичность и распространенность [1]. Однако необходимо отметить не решенную до сих пор проблему хранения и транспортировку водорода. Так, было показано, что физические методы хранения не могут широко использоваться. С другой стороны, химические методы, основанные на хранении в связанном состоянии, демонстрируют возможность размещения большого количества водорода в небольшом объеме [1]. Примеры таких систем — двумерные материалы [1; 2].

Недавние работы демонстрируют, что двумерные материалы, например, графен, нитрид бора, способны эффективно запасать топливо [2]. Более того, показано, что допирование таких систем металлическими атомами, например, литием, натрием, значительно улучшает характеристики хранения водорода. В таком случае металл становится центром адсорбции, вокруг которого формируется «облако» молекул водорода [2].

Важно, что перспективные для хранения водорода двумерные материалы должны быть легкими [2]. Атомы лития являются легчайшими металлами, поэтому в нашей работе предложено исследование материалов на их основе. Цель работы — изучить способность хранения водорода в двумерных LiOH [3], Li₂O [4], Li₂C и Li₃C [5] посредством моделирования из первых принципов. Ключевой задачей стал расчет энергии адсорбции на одну молекулу и массовой доли водорода.

В ходе работы было получено, что энергия адсорбции в LiOH и Li₂O слишком мала и составляет соответственно 20 и 105 мэВ. С другой стороны, расчеты показали, что энергия адсорбции для Li₃C при адсорбции двух и трех молекул составляет соответственно 194 и 174 мэВ при массовой доле водорода 5,78 и 8,43 % соответственно. Таким образом, мы делаем вывод, что двумерный Li₃C является перспективным материалом для будущих приложений хранения водорода.

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

Список литературы

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

ПОЛУЧЕНИЕ И ПРИМЕНЕНИЕ МЕЗО- И НАНОСТРУКТУРИРОВАННЫХ
ФУНКЦИОНАЛЬНЫХ МАГНИТНЫХ МАТЕРИАЛОВ

Выпуск 1

Материалы Первой Балтийской школы
по наноглеродным материалам (ПБШ «НУМ-2025»)
07—12 ноября 2025 года
Калининград

*Под редакцией доктора физико-математических наук
Ю. П. Свирко*

Научное электронное издание

Редактор *О. И. Бессчастнова*
Компьютерная верстка *Г. И. Винокуровой*

Дата выхода в свет 16.04.2026 г.
Формат 70×100¹/₁₆. Усл. печ. л. 8,1