

ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЕ И КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ЭЛЕКТРОННЫХ ВЗАИМОДЕЙСТВИЙ В УГЛЕРОДНЫХ НАНОСТРУКТУРАХ

Окотруб А. В., Булушева Л. Г.

Институт неорганической химии СО РАН,
Новосибирск, Россия, spectrum@che.nsk.su

Совместное рентгеноспектральное и квантово-химическое исследование электронной структуры проведено для углеродных наночастиц - нанотруб и луковиц, синтезированных разными методами. Рентгеновские эмиссионные спектры, возникающие благодаря электронным переходам с валентных уровней на внутреннюю вакансию, несут информацию о парциальной электронной плотности занятых уровней. Сопоставление спектров с результатами расчетов полуэмпирическим методом AMI позволяет изучить основные электронные взаимодействия и выявить особенности структуры исследуемых наночастиц. Так исследование углеродных нанолуковиц, синтезированных в результате отжига при различных температурах, позволили выявить существование дырок в углеродной сетке. Сравнение SKa-спектров многослойных и однослойных нанотруб, синтезированных как в электрической дуге, так и при разложении углеводородов на катализаторах, демонстрирует изменение электронной структуры, связанных с возникновением дефектов, в результате химической обработки и термического отжига.