

Новосибирский государственный университет  
Институт неорганической химии им. А.В. Николаева СО РАН  
Институт катализа им. Г.К. Борескова СО РАН  
Институт физики полупроводников им. А.В. Ржанова СО РАН  
Институт общей и неорганической химии им. Н.С. Курнакова РАН  
Сибирское отделение Российской академии наук

Четвертая российская конференция

# ГРАФЕН

МОЛЕКУЛА И 2D КРИСТАЛЛ

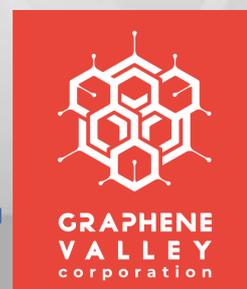
14–18 августа 2023 года

**N\*** Новосибирский  
государственный  
университет  
\*НАСТОЯЩАЯ НАУКА



**ЦНФМ**

РАЗРАБОТКА . МОДЕЛИРОВАНИЕ . ВНЕДРЕНИЕ



**Аналитика**  
ТЕХНОСФЕРА  
РЕКЛАМНО-ИЗДАТЕЛЬСКИЙ ЦЕНТР  
www.j-analytics.ru  
НАУЧНО-ТЕХНИЧЕСКИЙ ЖУРНАЛ

**НАНОИНДУСТРИЯ**  
ТЕХНОСФЕРА  
РЕКЛАМНО-ИЗДАТЕЛЬСКИЙ ЦЕНТР  
НАУЧНО-ТЕХНИЧЕСКИЙ ЖУРНАЛ

**NT-MDT**

г. Новосибирск



Уважаемые коллеги!

Благодарим Вас за проявленный интерес к Четвертой российской конференции «Графен: молекула и 2D кристалл» и желание принять участие в её работе. Конференция проходит в научно-образовательном центре города Новосибирска – Академгородке. Мероприятие посвящено актуальным направлениям исследований и разработок в области углеродных и низкоразмерных материалов.

Проведение конференции поможет координации усилий ученых в решении современных проблем материаловедения и привлечению молодых исследователей для решения актуальных научных задач.

Оргкомитет выражает особую благодарность НГУ, Центру компетенций НТИ «Моделирование и разработка новых функциональных материалов с заданными свойствами», компаниям «Диаэм», «НТ-МДТ Спектрум Инструментс» и корпорации “Графеновая Долина” за финансовую поддержку и журналам Аналитика, Наноиндустрия и РЭНСИТ за информационную поддержку.

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

Оргкомитет Конференции



ЦНФМ

РАЗРАБОТКА . МОДЕЛИРОВАНИЕ . ВНЕДРЕНИЕ



Федеральное государственное автономное образовательное учреждение  
высшего образования  
«Новосибирский национальный исследовательский  
государственный университет»

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки  
Институт неорганической химии им. А.В. Николаева  
Сибирского отделения Российской академии наук

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки  
Институт катализа им. Г.К. Борескова  
Сибирского отделения Российской академии наук

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки  
Институт физики полупроводников им. А.В. Ржанова  
Сибирского отделения Российской академии наук

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки  
Институт общей и неорганической химии им. Н.С. Курнакова  
Российской академии наук

Сибирское отделение Российской академии наук

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

**Сборник тезисов докладов**

**14–18 августа 2023 года**

Новосибирск, 2023

УДК 546.26+546.052+546.22

Программа и тезисы докладов Четвертой российской конференции «Графен: молекула и 2D-кристалл» / Ответственный за выпуск А.В. Окотруб. Новосибирск: ИНХ СО РАН, 2023, 171 с.

Сборник содержит доклады Четвертой российской конференции «Графен: молекула и 2D-кристалл», которая проводилась 14–18 августа 2023 года в Новосибирске.

В сборнике представлены доклады по направлениям: химический и CVD синтеза графена и родственных материалов; химическая модификация графена и гибридные 2D материалы; топологические изоляторы и полуметаллы Вейля; диагностика графена и других 2D материалов; теория, строение и моделирование свойств графена и родственных низкоразмерных материалов; электронные, механические, электрохимические и другие свойства и приложения графена и других 2D материалов.

**ISBN 978-5-90168-852-6**

### **ОРГАНИЗАТОРЫ КОНФЕРЕНЦИИ**

Новосибирский государственный университет  
Институт неорганической химии им. А.В. Николаева СО РАН  
Институт катализа им. Г.К. Борескова СО РАН  
Институт физики полупроводников им. А.В. Ржанова СО РАН  
Институт общей и неорганической химии им. Н.С. Курнакова РАН  
Сибирское отделение Российской академии наук

### **ПРОГРАММНЫЙ КОМИТЕТ**

Окотруб А.В., д.ф.-м.н., профессор, ИНХ СО РАН, Новосибирск – **председатель**  
Брылев К.А., д.х.н., профессор РАН, ИНХ СО РАН, Новосибирск  
Бухтияров В.И., академик РАН, ИК СО РАН, Новосибирск  
Губин С. П., д.х.н., профессор, ИОНХ РАН, Москва  
Елецкий А.В., д.ф.-м.н., профессор, НИУ «МЭИ», Москва  
Кузнецов В.Л., к.х.н., ИК СО РАН, Новосибирск  
Латышев А.В., академик РАН, ИПФ СО РАН, Новосибирск  
Максименко С.А., д.ф.-м.н., профессор, БГУ, Минск  
Насибулин А.Г., д.т.н., профессор, Сколтех, Москва  
Образцов А.Н., д.ф.-м.н., профессор, МГУ, Москва  
Федорук М.П., академик РАН, НГУ, Новосибирск  
Чернозатонский Л.А., д.ф.-м.н., профессор, ИБХФ РАН, Москва

### **СЕКРЕТАРИАТ КОНФЕРЕНЦИИ**

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

**Ограничение сверхскользкости: влияние релаксации структуры и наличия атомных дефектов на примере повернутых слоев графена**

А.М. Попов<sup>1</sup>, А.С. Минкин<sup>2</sup>, И.В. Лебедева<sup>3</sup>, А.А. Книжник<sup>4</sup>, С.А. Вырко<sup>5</sup>,  
Н.А. Поклонский<sup>5</sup>, Ю.Е. Лозовик<sup>1</sup>

<sup>1</sup>*Институт спектроскопии Российской академии наук, Физическая ул. 5,  
Троицк, Москва, Россия*

<sup>2</sup>*Институт прикладной математики им М.В.Келдыша Российской академии наук,  
Миусская пл. 4, Москва, Россия*

<sup>3</sup>*CIC nanoGUNE BRTA, San Sebastián 20018, Spain*

<sup>4</sup>*ООО "Кинтех Лаб", 3-я Хорошевская ул. 12, Москва, Россия*

<sup>5</sup>*Белорусский государственный университет, пр-т Независимости 4, Минск, Беларусь  
popov-isap@mail.ru*

**DOI: 10.26902/Graphene-23-126**

Явление структурной сверхскользкости [1] (сверхнизкого трения между твердыми поверхностями) важно для понимания атомистических механизмов трения. Несмотря на ряд исследований структурной сверхскользкости, см. обзор [2], мало внимания было уделено рассмотрению возможных причин ограничения макроскопической сверхскользкости. В данной работе поверхность потенциальной энергии (ППЭ), то есть зависимость энергии взаимодействия между слоями от координат, описывающих их относительное смещение, рассчитана с использованием классического потенциала и метода функционала плотности для набора соизмеримых структур муара идеального бислоя графена и в случае наличия вакансий в одном из слоев, соответственно. Обнаружено что для всех рассмотренных идеальных структур муара ППЭ, которая определяется симметрией системы, может быть аппроксимирована первой гармоникой разложения Фурье с точностью в пределах 1 %, подтверждая универсальное правило для сонаправленных слоев 2D-материалов [3]. Учет релаксации структуры слоев, а также наличие вакансий приводят к увеличению амплитуды неровностей ППЭ и, следовательно, статического трения на порядки величины. Таким образом, атомные дефекты и релаксация структуры могут быть причиной ограничения сверхскользкости.

*Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант № 23-42-10010, <https://rscf.ru/project/23-42-10010/>) и БРФФИ (грант № Ф23РФ-049).*

[1] Hirano M., Shinjo K. // Phys. Rev. B 1990. V. 41, № 17 P. 11837-11851.

[2] Hod O., Meyer E., Zheng Q. et al // Nature. 2018. V. 563, № 7732. P. 485-492.

[3] Lebedev A.V., Lebedeva I.V., Popov A.M., et al // Phys. Rev. B 2020. V. 102, № 4. P. 045418.