



БЕЛОРУССКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
ИНСТИТУТ ЯДЕРНЫХ ПРОБЛЕМ БГУ
НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ ТОМСКИЙ
ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ

УГЛЕРОДНЫЕ НАНОСТРУКТУРЫ, ТОНКИЕ ПЛЕНКИ И КОМПОЗИТЫ: СИНТЕЗ, ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА И ПРИМЕНЕНИЯ

Тезисы докладов
VI Белорусско-Российского семинара-конференции

Республика Беларусь, Минск, 2–5 ноября 2022 г.

Научное электронное издание



Минск, БГУ, 2022

УДК 661.66-022.532(06)+539.216.2(06)
ББК 35.20я431+22.37я431

Редакционная коллегия:

доктор физико-математических наук, профессор *С. А. Максименко* (гл. ред.);
кандидат биологических наук, доцент *Т. А. Кулагова*;
кандидат физико-математических наук, доцент *Д. С. Быченко*;
кандидат физико-математических наук *В. П. Кутавичюс*

Углеродные наноструктуры, тонкие пленки и композиты: синтез, физико-химические свойства и применения [Электронный ресурс] : тез. докл. VI Белорус.-Рос. семинара-конф., Респ. Беларусь, Минск, 2–5 нояб. 2022 г. / Белорус. гос. ун-т ; редкол.: С. А. Максименко (гл. ред.) [и др.]. – Минск : БГУ, 2022. – 1 электрон. опт. диск (CD-ROM). – ISBN 978-985-881-431-1.

Представлены тезисы докладов VI Белорусско-Российского семинара-конференции «Углеродные наноструктуры, тонкие пленки и композиты: синтез, физико-химические свойства и применения» («БелРосНано-2022»), организованного Белорусским государственным университетом, Институтом ядерных проблем БГУ, Национальным исследовательским Томским государственным университетом.

Минимальные системные требования:

PC, Pentium 4 или выше; RAM 1 Гб; Windows XP/7/10;
Adobe Acrobat.

Оригинал-макет подготовлен в программе Microsoft Word.

На русском и английском языках

В авторской редакции

Ответственный за выпуск *Т. А. Кулагова*

Подписано к использованию 28.10.2022. Объем 4,3 МБ.

Белорусский государственный университет.
Управление редакционно-издательской работы.
Пр. Независимости, 4, 220030, Минск.
Телефон: (017) 259-70-70.
email: urir@bsu.by
<http://elib.bsu.by>

ПРОГРАММНЫЙ КОМИТЕТ

Булусева Л.Г.	д-р хим. наук, ИНХ СО РАН (Новосибирск, Россия)
Быченко Д.С.	канд. физ.-мат. наук, доцент, НИИ ЯП БГУ (Минск, Беларусь)
Кузнецов В.Л.	канд. хим. наук, доцент, ИК СО РАН (Новосибирск, Россия)
Кулагова Т.А.	канд. биол. наук, доцент, НИИ ЯП БГУ (Минск, Беларусь)
Максименко С.А.	д-р физ.-мат. наук, профессор, НИИ ЯП БГУ (Минск, Беларусь)
Номоев А.В.	д-р физ.-мат. наук, доцент, ИФМ СО РАН (Улан-Удэ, Россия)
Насибулин А.Г.	д-р техн. наук, профессор, Сколтех (Москва, Россия)
Окотруб А.В.	д-р физ.-мат. наук, профессор, ИНХ СО РАН (Новосибирск, Россия)
Поклонский Н.А.	д-р физ.-мат. наук, профессор, член-корреспондент НАН Беларуси, иностранный член РАН, БГУ (Минск, Беларусь)
Суслев В.И.	канд. физ.-мат. наук, доцент, ТГУ (Томск, Россия)
Тиванов М.С.	канд. физ.-мат. наук, доцент, БГУ (Минск, Беларусь)
Углов В.В.	д-р физ.-мат. наук, профессор, БГУ (Минск, Беларусь)
Федотова Ю.А.	д-р физ.-мат. наук, НИИ ЯП БГУ (Минск, Беларусь)

ОРГАНИЗАЦИОННЫЙ КОМИТЕТ

Председатель: Максименко С.А., д-р физ.-мат. наук, профессор,
НИИ ЯП БГУ (Минск, Беларусь)

Зам. председателя: Тиванов М.С., канд. физ.-мат. наук, доцент, БГУ
(Минск, Беларусь)

Ученые секретари:

Кулагова Т.А., канд. биол. наук, доцент, НИИ ЯП БГУ (Минск, Беларусь)
Кутавичюс В.П., канд. физ.-мат. наук, НИИ ЯП БГУ (Минск, Беларусь).

Волынец Н.И.
Демиденко М.И.
Горохов Г.В.
Тимощенко И.А.

Кулик В.К.
Богданова А.В.
Чернявская Е.В.
Сергиевич М.Н.

СОДЕРЖАНИЕ

Абрамов С.А., Боровиков Г.И., Ковалев А.И., Шевелева В.С., Шиманский В.И., Горбачук Н.И., Загорская С.А., Козадаев К.В., Тиванов М.С. ПРОГРАММА ДОПОЛНИТЕЛЬНОГО ОБРАЗОВАНИЯ ОДАРЕННЫХ ДЕТЕЙ И МОЛОДЕЖИ “НАНОИНДУСТРИЯ И НАНОТЕХНОЛОГИИ”	11
<u>Адамчук Д.В.,</u> Демиденко М.И. СИНТЕЗ ЛЕГИРОВАННОГО БОРОМ ПИРОЛИТИЧЕСКОГО УГЛЕРОДА	12
<u>Антонова И.В.,</u> Шавелкина М.Б., Иванов А.И., Потеряев Д.А., Соотс Р.А., Бузмакова А.А. КОМПОЗИТЫ НА ОСНОВЕ ГРАФЕНА, НИТРИДА БОРА И PEDOT:PSS: СВОЙСТВА И ВОЗМОЖНЫЕ ПРИМЕНЕНИЯ.....	13
<u>Баскакова К. И.,</u> Дорожкин К.В., Седельникова О.В., Суслев В.И., Булушева Л.Г., Окотруб А.В. 3D-ПЕЧАТЬ ЧАСТОТНО ИЗБИРАТЕЛЬНЫХ ЭЛЕМЕНТОВ НА ОСНОВЕ ПОЛИМЕРНЫХ КОМПОЗИЦИОННЫХ МАТЕРИАЛОВ С ОДНОСЛОЙНЫМИ УГЛЕРОДНЫМИ НАНОТРУБКАМИ И ТЕРМОРАСШИРЕННЫМ ГРАФИТОМ.....	14
<u>Баскакова К. И.,</u> Самусов И.А., Городецкий Д.В., Федосеева Ю.В., Седельникова О.В., Булушева Л.Г., Окотруб А.В. ПЛАЗМОХИМИЧЕСКОЕ ОСАЖДЕНИЕ ИЗ ГАЗОВОЙ ФАЗЫ АЛМАЗНЫХ ПЛЕНОК, ДОПИРОВАННЫХ АЗОТОМ	15
<u>Батраков К.Г.</u> ВЛИЯНИЕ ДИНАМИЧЕСКОЙ ДИФРАКЦИИ НА ВОЗБУЖДЕНИЕ И РАСПРОСТРАНЕНИЕ ПЛАЗМОН-ПОЛЯРИТОНОВ В ГРАФЕНЕ	16
<u>Белько Н.В.,</u> Чижевский В.Н., Кулагова Т.А., Пархоц М.В., Лепешкевич С.В., Могилевцев Д.С. ГИСТЕРЕЗИС И СТАТИСТИКА ОПТИЧЕСКОГО ИЗЛУЧЕНИЯ ГРАФЕНОВЫХ КВАНТОВЫХ ТОЧЕК.....	17
<u>Бердюгин А.И.,</u> Бадьин А.В., Гурский Р.П., Шематило Т.Н., Дорожкин К.В. ОЦЕНКА ОДНОРОДНОСТИ КОМПОЗИТОВ НА ОСНОВЕ МУНТ С РАЗЛИЧНОЙ КОНЦЕНТРАЦИЕЙ И ВРЕМЕНЕМ УЛЬТРАЗВУКОВОЙ ОБРАБОТКИ	18
<u>Богданова А.В.,</u> Денисов А.А., Кулагова Т.А., Кузнецова Т.Е., Токальчик Д.П., Пашкевич С.Г., Губкин С.В. ГРАФЕНОВЫЕ КВАНТОВЫЕ ТОЧКИ ДЛЯ АДРЕСНОЙ ДОСТАВКИ ЛЕКАРСТВЕННЫХ ВЕЩЕСТВ.....	19
<u>Богданова А.В.,</u> Голубева Е.Н., Демиденко М.И., Кулагова Т.А. ВЛИЯНИЕ ПРЕКУРСОРА-ДОНОРА АЗОТА НА СПЕКТРАЛЬНЫЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ БОР-НИТРИДНЫХ КВАНТОВЫХ ТОЧЕК	20
<u>Волинец Н.И.,</u> Поддубская О.Г., Сысоев В.И., Городецкий Д.В., Булушева Л.Г., Окотруб А.В. РЕШЕТЧАТАЯ СТРУКТУРА НА ОСНОВЕ ФТОРИРОВАННОГО ГРАФЕНА В КАЧЕСТВЕ ПОЛЯРИЗАТОРА ТГЦ ИЗЛУЧЕНИЯ.....	21
<u>Гога А.В.,</u> Тумилович А.А., Позняк А.А., Завадский С.М., Бычек И.В., Плиговка А.Н. АНОДНО-ОКСИДНАЯ НАНОСТРУКТУРА, СФОРМИРОВАННАЯ АНОДИРОВАНИЕМ ДВУХСЛОЙНОЙ СИСТЕМЫ Al/Nb, ДЛЯ ПРИБОРНЫХ ПРИЛОЖЕНИЙ СВЧ ТРУБЧАТОЙ КАЛОРИМЕТРИИ.....	22

Гойхман Б.В., Федоров Ф.С., Симоненко Н.П., Симоненко Т.Л., Фисенко Н.А., Дубинина Т.С., Овчинников Г., Ланцберг А.В., Липатов А., Симоненко Е.П., Насибулин А.Г. ПРОГРАММИРУЕМОЕ СООСЖДЕНИЕ НАНОСТРУКТУРИРОВАННОГО AZO ДЛЯ СОЗДАНИЯ МУЛЬТИСЕНСОРНЫХ ГАЗОАНАЛИТИЧЕСКИХ СИСТЕМ.....	23
Городецкий Д.В., Седельникова О.В., Кондранова А.М., Баскакова К.И., Гурова О.А., Шляхова Е.В., Булушева Л.Г., Окотруб. А.В. ФОРМИРОВАНИЕ СТРУКТУРИРОВАННЫХ МАССИВОВ УНТ С ЛОКАЛЬНЫМ РАСПРЕДЕЛЕНИЕМ МИКРОКРИСТАЛЛОВ АЛМАЗОВ ПО ПОВЕРХНОСТИ	24
Горохов Г.В., Орловский А.В., Сидорик Н.Н., Мейсак Д.Н., Голубцов Г.В., Селютин А.Г., Ищенко А.В., Казакова М.А. ВЛИЯНИЕ МОДИФИКАЦИИ УГЛЕРОДНЫХ НАНОТРУБОК ЧАСТИЦАМИ Ag НА ЭЛЕКТРОМАГНИТНЫЕ СВОЙСТВА НАНОУГЛЕРОДНЫХ КОМПОЗИТОВ.....	25
Гребёнкина М.А., Гусельников А.В., Булушева Л.Г., Лавров А.Н., Окотруб А.В. ИССЛЕДОВАНИЕ СТРУКТУРНЫХ ОСОБЕННОСТЕЙ ФТОРИРОВАННОГО ГРАФИТА С ВНЕДРЁННЫМИ МОЛЕКУЛАМИ АЦЕТОНИТРИЛА НА ОСНОВЕ ИЗМЕРЕНИЯ ДИЭЛЕКТРИЧЕСКИХ И МАГНИТНЫХ ХАРАКТЕРИСТИК	26
Доросинец В.А., Самарина М.А., Ксенович В.К., Адамчук Д.В., Дорошкевич А.С. ПРОЯВЛЕНИЕ МАГНИТНЫХ СВОЙСТВ В НЕСТЕХИОМЕТРИЧЕСКИХ ПЛЕНКАХ НЕЛЕГИРОВАННОГО $\text{SnO}_{2-\delta}$	27
Дорофеев И.О., Мосеев С.И., Тетерина Д.Д., Дунаевский Г.Е., Суслев В.И., Кузнецов В.Л. ИССЛЕДОВАНИЕ КОМПОЗИТНОГО ВОЛОКНА ДЛЯ 3D ПЕЧАТИ В ОТКРЫТОМ РЕЗОНАТОРЕ	28
Доценко О.А., Журавлев В.А., Косых Д.С. ВЛИЯНИЕ ВНЕШНЕГО МАГНИТНОГО ПОЛЯ НА ДИЭЛЕКТРИЧЕСКУЮ ПРОНИЦАЕМОСТЬ МАГНИТНЫХ ЖИДКОСТЕЙ	29
Егорова М.Н., Смагулова С.А. ИССЛЕДОВАНИЕ СВОЙСТВ УГЛЕРОДНЫХ ТОЧЕК, СИНТЕЗИРОВАННЫХ ГИДРОТЕРМАЛЬНЫМ И СОЛЬВОТЕРМАЛЬНЫМ МЕТОДАМИ	30
Заманский К.К., Федоров Ф.С., Насибулин А.Г. ТЕРМОЦИКЛИРОВАНИЕ СВОБОДНО СТОЯЩИХ ПЛЕНОК УГЛЕРОДНЫХ НАНОТРУБОК КАК СПОСОБ ПОВЫШЕНИЯ СЕЛЕКТИВНОСТИ ГАЗОВЫХ СЕНСОРОВ НА ИХ ОСНОВЕ	31
Зур И.А., Федотов А.С., Харченко А.А., Федотова Ю.А., Мовчан С.А. ОПТИМИЗАЦИЯ УДЕЛЬНОЙ ЭЛЕКТРОПРОВОДНОСТИ РЕЗИСТИВНОГО ПОКРЫТИЯ КОЛЛЕКТОРНОГО ЭЛЕКТРОДА GEM-ДЕТЕКТОРА ДЛЯ КОМПЛЕКСА MPD NICA	32
Зур И.А., Шманай Е.Е., Ремнёв Г.Е., Федотова Ю.А. ЭРОЗИЯ DLC-ПОКРЫТИЙ GEM-ДЕТЕКТОРОВ ПРИ ВОЗДЕЙСТВИИ ПОВЕРХНОСТНОГО РАЗРЯДА АТМОСФЕРНОГО ДАВЛЕНИЯ	33
Иванов А.И., Антонова И.В. ГИБКИЕ МАТЕРИАЛЫ НА ОСНОВЕ ФТОРИРОВАННОГО ГРАФЕНА ДЛЯ МЕМРИСТОРОВ.....	34

<u>Ивашенко Д.В.,</u> Полин И.Ю., Горохов Г.В., Быченко Д.С., Паньков В.В. МАГНИТНЫЕ НАНОЧАСТИЦЫ CoZn ФЕРРИТА ДЛЯ ПОГЛОЩЕНИЯ СВЧ-ИЗЛУЧЕНИЯ	35
<u>Карева К.В.,</u> Вагнер Д.В., Журавлев В.А. СТАТИЧЕСКИЕ И ДИНАМИЧЕСКИЕ МАГНИТНЫЕ СВОЙСТВА ПОЛИКРИСТАЛЛИЧЕСКИХ ГЕКСАФЕРРИТОВ СИСТЕМЫ $\text{Ba}_2\text{Ni}_{2-x}\text{Cu}_x\text{Fe}_{12}\text{O}_{22}$	36
Козлов В.С., Быков А.А., Еремин А.В, Попова Е.А., Масгутов И.И., <u>Байрамуков В.Ю.</u> ИНТЕРКАЛЯТЫ Eu^{III} В ДОМЕНАХ ТУРБОСТРАТНОГО УГЛЕРОДА	37
Колесов Е.А., Тиванов М.С., Королик О.В., Свито И.А., <u>Антонович А.С.,</u> Капитанова О.О., Панин Г.Н. ВЛИЯНИЕ ПРОПУСКАНИЯ ЭЛЕКТРИЧЕСКОГО ТОКА НА ФОНОННЫЕ И ЭЛЕКТРОННЫЕ СВОЙСТВА ГРАФЕНА НА SiO_2/Si И Al_2O_3	38
Ксенович В.К., <u>Громов И.Н.,</u> Горбачук Н.И., Шуба М.В. ЭЛЕКТРОПРОВОДНОСТЬ НА ПОСТОЯННОМ И ПЕРЕМЕННОМ ТОКЕ ГИБРИДНЫХ ПЛЕНОК ИЗ УГЛЕРОДНЫХ И WS_2 -НАНОТРУБОК	39
<u>Кузнецов В.Л.,</u> Мосеенков С.И., Золотарев Н.А., Колесов Б.А., Просвирин И.П., Ищенко А.В., Заворин А.В. АМОРФНЫЙ УГЛЕРОД В НАНОСТРУКТУРИРОВАННЫХ УГЛЕРОДНЫХ МАТЕРИАЛАХ (СОВМЕСТНОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ПЭМ, РФЭС, СКР И РФА)	40
<u>Кулагова Т.А.,</u> Голубева Е.Н. ТЕРАНОСТИЧЕСКИЙ ПОТЕНЦИАЛ УГЛЕРОДНЫХ НАНОМАТЕРИАЛОВ	41
<u>Кулешов Г.Е.,</u> Трофимов Е.А., Бадьин А.В. МОДЕЛИРОВАНИЕ ЭЛЕКТРОМАГНИТНОГО ОТКЛИКА ОТ КОМПОЗИЦИОННЫХ СТРУКТУР НА ОСНОВЕ ПЛАСТИКОВ ДЛЯ 3D ПЕЧАТИ С ВКЛЮЧЕНИЯМИ УГЛЕРОДНЫХ НАНОТРУБОК	42
<u>Кулик В.К.,</u> Кулагова Т.А., Голубева Е.Н., Демиденко М.И., Бугай А.Н. МОДЕЛИРОВАНИЕ ЭФФЕКТОВ НЕЙТРОНЗАХВАТНОЙ ТЕРАПИИ С ПРЕПАРАТАМИ БОРА И ГАДОЛИНИЯ	43
<u>Кульвелис Ю.В.,</u> Лебедев В.Т., Примаченко О.Н., Швидченко А.В., Юдина Е.Б. КОМПОЗИТНЫЕ ПРОТОНОПРОВОДЯЩИЕ МЕМБРАНЫ С НАНОАЛМАЗАМИ ДЛЯ ВОДОРОДНОЙ ЭНЕРГЕТИКИ	44
<u>Кухто А.В.,</u> Поддубская О.Г., Максименко С.А., Кулагова Т.А., Павич Т.А. ЭЛЕКТРОПРОВОДНЫЕ ЛЮМИНЕСЦЕНТНЫЕ ГИБРИДНЫЕ МАТЕРИАЛЫ НА ОСНОВЕ ПОЛИМЕР-ГРАФЕНОВЫХ КОМПОЗИТОВ	45
<u>Лопашина Е.П.,</u> Годзишевская А.А., Курасова М.Н., Андреева О.И., Критченков А.С. МЕХАНИЧЕСКИЕ И КАТАЛИТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА Ir- И Rh- СОДЕРЖАЩИХ ХИТОЗАНОВЫХ ПЛЁНОК	46
<u>Мальтанова А.М.,</u> Позняк С.К. ВЛИЯНИЕ УСЛОВИЙ ТЕРМООБРАБОТКИ НА ЭЛЕКТРОХИМИЧЕСКИЕ И ФОТОЭЛЕКТРОХИМИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА НАНОТРУБОК TiO_2	47

Матыскин К.Е., Сусляев В.И., Коровин Е.Ю., Денисенко А.В., Дорожкин К.В., Гладков Ю.Н. МАТЕРИАЛ, ОБЕСПЕЧИВАЮЩИЙ ЭЛЕКТРОМАГНИТНУЮ ГЕРМЕТИЧНОСТЬ НА ВЫСОКИХ ЧАСТОТАХ	48
<u>Мельников А.В., Шуба М.В. РАССЕЯНИЕ МИКРОВОЛННОГО И ТЕРАГЕРЦОВОГО ИЗЛУЧЕНИЯ НА ДВУХСЛОЙНОЙ УГЛЕРОДНОЙ НАНОТРУБКЕ С УЧЕТОМ МЕЖСЛОЙНОГО ПЕРЕНОСА ЗАРЯДА</u>	49
<u>Мисиюк Ф.Ю., Поддубская О.Г., Волынец Н.И., Батраков К.Г. ГЕТЕРОСТРУКТУРЫ ГРАФЕН/ЖИДКИЙ КРИСТАЛЛ КАК КОМПОНЕНТЫ ТЕРАГЕРЦОВОЙ ФОТОНИКИ</u>	50
<u>Москаленко В.Д., Бадьин А.В., Кулешов Г.Е., Сусляев В.И., Ланин Е.В. ЭЛЕКТРОМАГНИТНЫЕ СВОЙСТВА КОМПОЗИЦИОННЫХ МАТЕРИАЛОВ НА ОСНОВЕ МНОГОСТЕННЫХ УГЛЕРОДНЫХ НАНОТРУБОК И АКРИЛОНИТРИЛБУТАДИЕНСТИРОЛА В ТЕРАГЕРЦОВОМ ДИАПАЗОНЕ.....</u>	51
<u>Москвитина Е.Н., Кузнецов В.Л., Мосеенков С.И., Серкова А.Н., Заворин А.В. СРАВНИТЕЛЬНОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ЦИТОТОКСИЧНОСТИ НАНОСТРУКТУРИРОВАННЫХ УГЛЕРОДНЫХ МАТЕРИАЛОВ.....</u>	52
<u>Мрочко В.Э., Шуба М.В., Зур И.А. РАССЕЯНИЕ ИЗЛУЧЕНИЯ ДИМЕРОМ МЕТАЛЛИЧЕСКИХ НАНОЧАСТИЦ В ДАЛЬНОМ ИНФРАКРАСНОМ ДИАПАЗОНЕ ..</u>	53
<u>Номоев А.В., Чимытов Т.А., Базарова Д.Ж., Гармаев Б.З., Атутов Е.Б., Басанов Б.В., Коровин А.Ю. ПОЛИМЕРНО-ДИСПЕРСНЫЕ КОМПОЗИТНЫЕ ЖИДКОКРИСТАЛЛИЧЕСКИЕ ПЛЕНКИ В ПАТЧ-АНТЕННАХ ДЛЯ 5G КОММУНИКАЦИЙ.....</u>	54
<u>Оводок Е.А., Позняк С.К., Мальтанова А.М., Ивановская М.И., Гаевская Т.В. СТРУКТУРА И СВОЙСТВА КОМПОЗИТОВ НА ОСНОВЕ НАТРИЕВОЙ СОЛИ ПОЛИАКРИЛОВОЙ КИСЛОТЫ И МАКСЕНА (Ti3C2).....</u>	55
<u>Окотруб А.В., Городецкий Д.В., Пальянов Ю.Н., Чувилин А.Л., Булушева Л.Г. ТЕРМИЧЕСКАЯ И КАТАЛИТИЧЕСКАЯ ГРАФИТИЗАЦИЯ АЛМАЗНЫХ ГРАНЕЙ</u>	56
<u>Окотруб А.В., Федоренко Н.Д., Городецкий Д.В., Гусельников А.В., Булушева Л.Г. ИССЛЕДОВАНИЕ ОСОБЕННОСТЕЙ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ПЛЕНОК MOS₂ С ЛИТИЕМ И НАТРИЕМ</u>	57
<u>Петров А.В., Каланда Н.А., Ярмолич М.В. ИСПОЛЬЗОВАНИЕ УЛЬТРАЗВУКОВОЙ ОБРАБОТКИ ДЛЯ ПОЛУЧЕНИЯ НАНОПОРОШКА ФЕРРОМОЛИБДАТА СТРОНЦИЯ</u>	58
<u>Поклонский Н.А., Раткевич С.В., Вырко С.А., Власов А.Т. СХЕМА ГЕНЕРАЦИИ ПОТОКА ОТРИЦАТЕЛЬНО ЗАРЯЖЕННЫХ МОЛЕКУЛ НА ИЗОГНУТЫХ ЛИСТАХ ГРАФЕНА</u>	59
<u>Пушкарчук А.Л., Безъязычная Т.В., Поткин В.И., Дикусар Е.А., Солдатов А.Г., Килин С.Я., Низовцев А.П., Кутень С.А., Пушкарчук В.А., Dominik Ludewig Michels, Dmitry Lyakhov, Кульчицкий В.А. DFT МОДЕЛИРОВАНИЕ КОНЪЮГАТА</u>	

КАРБОПЛАТИН – ФУЛЛЕРЕНОЛ КАК ПЕРСПЕКТИВНОЙ ОСНОВЫ ПРОТИВООПУХОЛЕВОЙ ТЕРАПИИ	60
<u>Пушкарчук А.Л., Хлопина Т.С., Кутень С.А., Батраков К.Г., Dominik Ludewig Michels, Dmitry Lyakhov</u> МОДЕЛИРОВАНИЕ НАНОКОМПОЗИТА ГРАФЕН/ПММА МЕТОДОМ КВАНТОВОЙ ХИМИИ	61
<u>Пушкарчук В.А., Низовцев А.П., Могилевцев Д.С., Килин С.Я., Пушкарчук А.Л., Кутень С.А., Dominik Ludewig Michels, Dmitry Lyakhov</u> СТРУКТУРНЫЕ, ЭЛЕКТРОННЫЕ И ОПТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ДВУХ NV-ЦЕНТРОВ В НАНОАЛМАЗЕ КАК МОДЕЛИ КВАНТОВОГО ИЗЛУЧАТЕЛЯ: КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ	62
<u>Пушкарчук А.Л., Хлопина Т.С., Кулагова Т.А., Голубева Е.Н., Мигас Д.Б., Dominik Ludewig Michels, Dmitry Lyakhov</u> СТРУКТУРНЫЕ И ЭЛЕКТРОННЫЕ СВОЙСТВА КОНЬЮГАТА ГРАФЕНОВАЯ КВАНТОВАЯ ТОЧКА-МОЛЕКУЛА ДОКСОРУБИЦИНА: DFT МОДЕЛИРОВАНИЕ	63
<u>Рабинович О.С., Малиновский А.И., Лях М.Ю., Кузнецов В.Л., Мосеенков С.И., Заворин А.В., Голубцов Г.В., Гойдин В.В.</u> КРИТИЧЕСКИЕ УСЛОВИЯ ПОТЕРИ ГОМОГЕННОСТИ ПСЕВДООЖИЖЕННОГО СЛОЯ ПРИ КАТАЛИТИЧЕСКОМ СИНТЕЗЕ МУНТ	64
<u>Ремизов М.В., Лебедев В.Т., Козлов В.С.</u> ИССЛЕДОВАНИЯ МЕТАЛЛО- УГЛЕРОДНЫХ НАНОСТРУКТУР ЯДЕРНО-ФИЗИЧЕСКИМИ МЕТОДАМИ	65
<u>Ремизов М.В., Лебедев В.Т.</u> ЭФФЕКТ ЛАНТАНОИДНОГО СЖАТИЯ ЭНДОЭДРАЛЬНЫХ АТОМОВ В МЕТАЛЛОФУЛЛЕРЕНАХ	66
<u>Ремизов М.В., Козлов В.С., Богмут Д.И., Лебедев В.Т.</u> УГЛЕРОДНЫЕ НАНОМАТЕРИАЛЫ ГАММА-РЕЗОНАНСНАЯ СПЕКТРОСКОПИЯ В ПИЯФ НИЦ «КУРЧАТОВСКИЙ ИНСТИТУТ»: СОСТОЯНИЕ И ПЕРСПЕКТИВЫ СОЗДАНИЯ IN- BEAM СПЕКТРОМЕТРА НА РЕАКТОРЕ ПИК	67
<u>Романов О.Г., Тимошенко И.А.</u> МОДЕЛИРОВАНИЕ ОПТОАКУСТИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ В СИСТЕМАХ С УГЛЕРОДНЫМИ НАНОСТРУКТУРАМИ	68
<u>Седельникова О.В., Городецкий Д.В., Волынец Н.И., Поддубская О.Г., Максименко С.А., Булушева Л.Г., Окотруб А.В.</u> ГИБКИЕ ЭКРАНЫ ТЕРАГЕРЦОВОГО ИЗЛУЧЕНИЯ НА ОСНОВЕ МАССИВОВ УГЛЕРОДНЫХ НАНОТРУБОК	69
<u>Седельникова О.В., Окотруб А.В., Городецкий Д.В., Асанов И.П., Федоренко А., Гурова О.А.</u> ПЕРЕСТРОЙКА ПОВЕРХНОСТЕЙ МОНОКРИСТАЛЛА АЛМАЗА ПОД ПЛЕНКОЙ МОЛИБДЕНА В РЕЗУЛЬТАТЕ НАГРЕВА В ВЫСОКОМ ВАКУУМЕ	70
<u>Сысоев В.И., Гурова О.А., Лаврухина С.А., Булушева Л.Г., Окотруб А.В.</u> КОВАЛЕНТНАЯ И НЕКОВАЛЕНТНАЯ МОДИФИКАЦИЯ УГЛЕРОДНЫХ НАНОТРУБОК ДЛЯ СЕНСОРНЫХ ПРИЛОЖЕНИЙ	71

<u>Туровец У.Е., Позняк А.А., Голосов Д.А., Тумилович А.А., Плиговка А.Н.</u> УЛЬТРАТОНКИЙ ЭЛЕКТРОННО-БЛОКИРУЮЩИЙ ОКСИД АЛЮМИНИЯ ДЛЯ ИК СВЕТОДИОДА НА КОЛЛОИДНЫХ КВАНТОВЫХ ТОЧКАХ PbS	72
<u>Углов В.В.</u> СИНТЕЗ И МЕХАНИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА МЕТАЛ-УГЛЕРОДНЫХ КОМПОЗИТОВ	73
<u>Федосеева Ю.В., Шляхова Е.В., Ворфоломеева А.А., Гребёнкина М.А., Булусева Л.Г., Окотруб А.В.</u> ДИАГНОСТИКА БРОМИРОВАННЫХ УГЛЕРОДНЫХ НАНОМАТЕРИАЛОВ И ИХ МАГНИТНЫЕ И ЭЛЕКТРОХИМИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА.	74
<u>Червинская А.С., Доценко О.А., Беломытцева Е.С., Качусова А.О.</u> ВЛИЯНИЕ УЛЬТРАЗВУКОВОЙ ОБРАБОТКИ НА ДИЭЛЕКТРИЧЕСКУЮ ПРОНИЦАЕМОСТЬ КОМПОЗИТОВ С УГЛЕРОДНЫМИ НАНОТРУБКАМИ	75
<u>Шаншо А., Дорофеев И.О., Дунаевский Г.Е.</u> ЧАСТОТНАЯ СТАБИЛИЗАЦИЯ ЛОВ ДЛЯ РЕЗОНАТОРНЫХ ИЗМЕРЕНИЙ ПОЛЯРИЗУЕМОСТИ МАЛЫХ КОМПОНЕНТОВ КОМПОЗИЦИОННЫХ МАТЕРИАЛОВ	76
<u>Шуба М.В.</u> НАНОЧАСТИЦЫ С МНОГОРЕЗОНАНСНЫМ РАССЕЯНИЕМ В ДАЛЬНЕМ ИК ДИАПАЗОНЕ.....	77
<u>Ярмолич М.В., Каланда Н.А., Петров А.В.</u> ПОЛУЧЕНИЕ ГРАНУЛИРОВАННЫХ ПЛЕНOK SR_2FeMOO_6 И ИХ МАГНИТНЫЕ СВОЙСТВА	78
<u>Bulavskiy M.O., Fedorov F.S, Nasibulin A.G.</u> PHYSICO-CHEMICAL PROPERTIES EVOLUTION AND INTERNAL CHANNELS OPENING OF SINGLE-WALLED CARBON NANOTUBES UNDER ELECTROCHEMICAL TREATMENT	79
<u>Bulusheva L.G., Semushkina G.I., Fedoseeva Yu.V., Sysoev V.I., Okotrub A.V.</u> INTERACTION OF PARTIALLY FLUORINATED GRAPHITE WITH PHOTONS	80
<u>Bulusheva L.G., Kotsun A.A., Koroteev V.O., Stolyarova S.G., Okotrub A.V.</u> COUPLING OF GRAPHENE LAYERS WITH MOLYBDENUM DISULFIDE FOR BOOSTING OF LITHIUM AND SODIUM STORAGE	81
<u>Butt H.A., Novikov I.V., Krasnikov D.V., Sulimov A.V., Pal A.K., Evlashin S.A., Vorobei A.M., Zuev Y.I., Ostrizhiniy D., Dzhurinskiy D., Popov Y.A., Parenago O.O., Nasibulin A.G.</u> THE EFFECT OF BULK DENSITY ON THE PERFORMANCE OF SINGLE- WALLED CARBON NANOTUBE-THERMOSET NANOCOMPOSITES	82
<u>Bychanok D., Padrez Y., Liubetski N., Arlouski A., Kushniarou U., Korobov I., Halimski I., Kulahava T., Demidenko M., Urbanowicz A., Macutkevic J.</u> THIN FILMS FOR MICROWAVE ABSORPTION AND TERAHERTZ APPLICATIONS.....	83
<u>Dikumar E.A., Pushkarchuk A.L., Bezyazychnaya T.V., Akishina E.A., Soldatov A.G., Kuten S.A., Stepin S.G., Nizovtsev A.P., Kilin S.Ya., Kulchitsky V.A., Potkin V.I.</u> QUANTUM-CHEMICAL MODELING OF DOXORUBICIN-FULLERENOL AGENTS OF CANCER THERAPY	84
<u>Kondrashov I.I., Fedotov P.V., Obraztsova E.D.</u> PECULIARITIES OF CVD MOS_2 SYNTHESIS FOR GRAPHENE HETEROSTRUCTURES	85

<u>Korobov I.D., Demidenko M.I., Bychanok D.S.</u> CAVITY METHOD OF POLARIZABILITY AND PERMITTIVITY MEASUREMENTS OF SPHERICAL COMPOSITE OBJECTS.....	86
<u>Krasnikov D.V., Khabushev E.M., Novikov I.V., Grebenko A.K., Bogdanova A.R., Alekseeva A.A., Ramirez J.A.B., Raginov N.I., Iakovlev V.Ya., Nasibulin A.G.</u> NEW METHODS FOR SYNTHESIS AND MODIFICATION OF NANOCARBONS	87
<u>Nizovtsev A.P., Pushkarchuk A.L., Kuten S.A., Michels D., Lyakhov D., Kargin N.I., Gusev A.S., Kilin S.Ya.</u> SIMULATION OF ^{13}C-^{13}C J-COUPLING TENSORS IN DIAMOND CLUSTERS HOSTING THE NV COLOR CENTER.....	88
<u>Novitsky A., Paddubskaya A.</u> THEORETICAL DESCRIPTION OF ELECTROMAGNETIC RADIATION INTERACTION WITH GRAPHENE METASURFACES.....	89
<u>Panasenko Iu.V., Bulavskiy M.O., Iurchenkova A.A., Aguilar-Martinez Ye., Fedorov F.S., Fedorovskaya E.O., Mikladal B., Kallio T., Nasibulin A.G.</u> SYNTHESIS AND CAPACITIVE PROPERTIES OF COMPOSITES BASED ON POLYANILINE DEPOSITED AT FREE-STANDING SINGLE-WALLED CARBON NANOTUBES	90
<u>Pavlov A., Mozharov A., Berdnikov Y., Barbier C., Harmand J-C., Tchernycheva M., Polozkov R., Mukhin I.</u> CRYSTAL POLARITY DISCRIMINATION IN GaN NANOWIRES ON GRAPHENE	91
<u>Polozkov R.G., Pavlov A.V., Portnoi M.E., Shelykh I.A.</u> AB-INITIO STUDY OF ELECTRONIC PROPERTIES OF 2D AND 3D REGULAR ARRAYS OF CARBON NANOTUBES	92
<u>Raginov N.I., Kurtukova T.N., Faichu N., Ilatovskii D.A, Kopylova D.S., Fedorov F.S., Krasnikov D.V., Nasibulin A.G.</u> VANADIUM FOG – DIRECT COATING OF CARBON NANOTUBES BY V_2O_5 IN AEROSOL STATE.....	93
<u>Ramirez J.A.B., Krasnikov D.V., Gubarev V.V., Novikov I.V., Kondrashov V.A., Starkov A.V., Krivokorytov M.S., Medvedev V.V., Gladush Yu.G., Nasibulin A.G.</u> RENEWABLE SINGLE-WALLED CARBON NANOTUBE MEMBRANES FOR EXTREME ULTRAVIOLET PELLICLE APPLICATIONS	94
<u>Shuangqiang Shi, Cheng Yang, Yubin Chen, Hairong Chu</u> A NOVEL HONEYCOMB STRUCTURE COMBINED WITH GRAPHENE AEROGEL AND COATING FOR HIGH-PERFORMANCE ELECTROMAGNETIC WAVE ABSORPTION	95
<u>Tonkikh A.A., Rybkovskiy D.V., Obraztsova E.D.</u> CHARGE-INDUCED STRUCTURE MODULATIONS OF 1D-IODINE INSIDE THIN SWCNTs.....	96
<u>Tsyhanok D.V., Paddubskaya A.G., Valynets N.I., Batrakov K.G., Korolik O.V.</u> GRAPHENE RAMAN SPECTRA FEATURES IN THE GRAPHENE/hBN HETEROSTRUCTURE DEPOSITED ON SiO_2/Si SUBSTRATE.....	97

ПРОГРАММА ДОПОЛНИТЕЛЬНОГО ОБРАЗОВАНИЯ ОДАРЕННЫХ ДЕТЕЙ И МОЛОДЕЖИ “НАНОИНДУСТРИЯ И НАНОТЕХНОЛОГИИ”

^аАбрамов С.А., ^бБоровиков Г.И., ^аКовалев А.И., ^аШевелева В.С., ^аШиманский В.И.,
^аГорбачук Н.И., ^аЗагорская С.А., ^аКозадаев К.В., ^аТиванов М.С.

^а *Белорусский государственный университет, Минск, Беларусь*

^б *УО “Национальный детский технопарк”, Минск, Беларусь*

В силу непрерывно возрастающей экономической значимости нанотехнологии требуют особого внимания со стороны учреждений образования. Динамичное развитие отрасли должно поддерживаться непрерывным совершенствованием системы подготовки высококвалифицированных кадров.

Непрерывность образовательного процесса от школы до магистратуры и аспирантуры, включая все этапы профориентационной работы, способствует повышению уровня профессиональной подготовки и развитию творческого потенциала молодежи. Программы дополнительного образования заполняют интервал между школьным и университетским обучением, обеспечивая их комплиментарность.

Для реализации непрерывности подготовки на физическом факультете была разработана образовательная программа дополнительного образования одаренных детей и молодежи “Наноиндустрия и нанотехнологии”. Основными ее целями являются: формирование условий для профессионального самоопределения в области естественных и технических наук, повышение мотивации детей к учебе и труду, выявление и развитие творческих способностей, интереса к научно-исследовательской и инновационной деятельности, реализация их личностного потенциала. Программа рассчитана на учащихся 10–11 классов. Образовательный процесс осуществляется в режиме шестидневной учебной недели. Наполняемость учебных групп — 10–12 учащихся. Учебно-тематический план рассчитан на 72 учебных часа за образовательную смену.

В фокусе программы интерактивность, проектный подход и командная работа. Программа предусматривает возможность выполнения технологических кейсов, приближенных к реальным производственным процессам. Вариативность обеспечивается достаточно широким набором оборудования: от 3D-сканеров и 3D-принтеров до рентгеновского дифрактометра и магнетронной напылительной установки. Это позволяет привить обучающимся первичные навыки прохождения полного цикла создания инженерного продукта. В работе над проектом ученики получают не только новые знания по физике наноматериалов и их использованию в технике, но и надпредметные компетенции: умение работать в коллективе, способность анализировать информацию и принимать решения. В целом это позволит обучающимся стать в будущем успешными специалистами в любой области нанотехнологий.

На базе физического факультета БГУ первая смена прошла обучение по программе в сентябре 2022г. Результаты анкетирования 10 участников свидетельствуют о достаточно высокой степени удовлетворённости: 80% удовлетворены качеством обучения, 20% — частично удовлетворены. Все формы проведения занятий (введение в проблему исследования, лабораторно-практические занятия и т.д.) понравились 20% респондентам, 70% особо отметили лабораторно-практические занятия, 10% — затруднились ответить. Отдельно следует отметить то, что 60% опрошенных нацелены на продолжение образования по направлению.

Таким образом можно полагать что разработанная образовательная программа эффективна в части достижения одной из главных своих целей — обеспечение условий для профессионального самоопределения школьников в области естественных и технических наук.

СИНТЕЗ ЛЕГИРОВАННОГО БОРОМ ПИРОЛИТИЧЕСКОГО УГЛЕРОДА

^{a, b} Адамчук Д.В., ^bДемиденко М.И.

^a *Белорусский государственный университет, Минск, Беларусь*

^b *НИИ «Институт ядерных проблем» БГУ, Минск, Беларусь*

В настоящее время использование углерод-углеродных материалов существенно расширяется и требует разработки материалов с улучшенными характеристиками. Одним из перспективных материалов является пироуглерод – поликристаллическая форма углерода, отличающаяся от графита высокой степенью ориентации углеродных слоев [1]. Высокая степень ориентации приводит к анизотропии тепловых, электрических и механических характеристик. Пироуглерод представляет собой материал с высокой биосовместимостью, высокими механическими характеристиками и используется в сердечных клапанах с 1970-х годов [2] и для костных протезов с 1990-х годов [3]. Однако существует потребность в улучшении механических характеристик материала на основе пироуглерода.

Для решения проблемы была разработана технология синтеза легированного бором пироуглеродного материала методом химического осаждения из газовой фазы (CVD). Технология CVD является перспективной для изготовления углерод-углеродных (C-C) композитов, которая используется достаточно длительное время [4]. Установка представляет собой нагреваемую до 1400 - 1500 °С цилиндрическую графитовую сборку, через которую пропускается смесь газов. В процессе работы было установлено, что предпочтителен косвенный нагрев сборки графитовым цилиндрическим углеродным нагревателем, который позволяет более равномерно поддерживать температуру в графитовой сборке, что необходимо для синтеза однородного материала: легированного бором пиролитического углерода. В качестве углерод-содержащих газов используются метан и пропан-бутановая смесь, последняя позволяет существенно увеличить скорость осаждения и роста материала в реакторе в процессе пиролиза. Источником бора является газообразное соединение BCl₃, которое в горячем реакторе распадается на отдельные атомы и атомы бора вступают в реакцию с активным углеродом с образованием карбида бора, обладающего высокими прочностными характеристиками. Одной из существенных проблем, возникающих в процессе разложения углеводородных газов является образование большого количества атомарного водорода, который реагирует с хлором с образованием кислоты. Для того, чтобы уменьшить концентрации опасных паров в реакционной камере добавляется газообразный азот, который также стабилизирует структуру осаждаемого пироуглеродного материала. Следует отметить, что данная установка требовательна к вакууму, поскольку любые течи приводят к натеканию кислорода из атмосферы и образованию реакционных паров, способных разрушать материал камеры. Варьированием технологических параметров синтеза (расходы газов, температура и давление в реакционной камере) возможен синтез материала с высокими прочностными характеристиками от 50 до 140 HRC.

Библиографические ссылки

1. Amell R. D. et. al. / Proceedings of the Institution of Mechanical Engineers, Conference Proceedings. 1964. Vol. 179, № 10. P. 115–122.
2. Bokros J. C. / Carbon. 1977. Vol. 15, № 6. P. 353–371.
3. Beckenbaugh R. D. et. al. / The Journal of Hand Surgery. 2006. № 7 (31). P. 1240–1241.
4. Ismail I. et. al. / Carbon. 1991. Vol. 29, № 4–5. P. 575–585.

КОМПОЗИТЫ НА ОСНОВЕ ГРАФЕНА, НИТРИДА БОРА И PEDOT:PSS: СВОЙСТВА И ВОЗМОЖНЫЕ ПРИМЕНЕНИЯ

^{a,b}Антонова И.В., ^cШавелкина М.Б., ^aИванов А.И., ^{a,b}Потеряев Д.А.,
^aСоотс Р.А., ^{a,b}Бузмакова А.А.

^a Институт физики полупроводников им. А.В.Ржанова СО РАН, Новосибирск, Россия

^bНовосибирский государственный технический университет, Новосибирск, Россия

^cОбъединенный институт высоких температур РАН, Москва, Россия

Формирование композитов на основе графена с незначительными добавками различных частиц или веществ, как известно, позволяет существенно менять структуру и свойства получаемых материалов. В данной работе мы исследовали влияние добавок непроводящих частиц гексагонального нитрида бора (h-BN) и проводящего полимера PEDOT:PSS на свойства композитных слоев графена. Тестовые структуры создавались с использованием 2D принтера, поэтому формировались композитные частицы и суспензии (чернила) из этих частиц для печати. Найден способ синтеза композитных наночастиц на основе гексагонального нитрида бора и графена (G) уже в растворе и показано, что изменения соотношения веществ приводило к изменениям морфологии и структуры наночастиц [1]. Важной особенностью исходного материала (графена и h-BN), использованного для получения композитных наночастиц, является их синтез в плазме. Это приводило к узкому распределению параметров частиц: так, h-BN имел латеральные размеры 30 – 50 нм при толщине 1-4 монослоя (до 1.5 нм), а графеновые частицы имели размер 100 – 150 нм и аналогичную толщину. Исследование исходных синтезированных в плазме материалов с помощью атомно силовой микроскопии и спектроскопии комбинационного рассеяния света наночастиц графена и h-BN показало их структурное качество. Варьируя состав композита, можно получить пленки, различные как по морфологическим, так и по электрическим характеристикам. При составах h-BN:Gr = 1:(4-10), наблюдались частицы графена, капсулированные частицами h-BN, вертикально или горизонтально расположенными на графене, и наблюдаются нелинейные вольт-амперные характеристики с гистерезисом величиной до 4 порядков, что связано с формированием мультибарьерной системы. Взаимодействие h-BN и графена приводило к появлению запрещенной зоны величиной 18–27 мэВ. Добавление проводящего полимера PEDOT:PSS к графену или к композитным частицам даже в незначительной ($\sim 10^{-3}$ массовых %) концентрации приводило к значительному улучшению гибкости получаемых структур и, при определенных условиях, увеличению проводимости композитных слоев. Это расширяет спектр возможных приложений структур из композитных материалов. Композитные наночастицы могут быть использованы для создания гибких сенсоров (сенсоров влажности, химических сенсоров, биосенсоров), антенн 4G-5G диапазона, туннельных транзисторных структур, элементов логики и мемристоров с использованием 2D печатных технологий [2,3].

Авторы благодарны за поддержку фонду РНФ, грант № 22-19-00191.

Библиографические ссылки

1. Antonova I.V. et al / Adv. Eng. Mat. 2022. Vol. 24. P. 2100917.
2. Antonova I.V. et al / Nanomaterials. 2020. Vol. 10. P. 2050.
3. Popov V.I. et al / Materials. 2019. Vol. 12. P. 3477.

3D-ПЕЧАТЬ ЧАСТОТНО ИЗБИРАТЕЛЬНЫХ ЭЛЕМЕНТОВ НА ОСНОВЕ ПОЛИМЕРНЫХ КОМПОЗИЦИОННЫХ МАТЕРИАЛОВ С ОДНОСЛОЙНЫМИ УГЛЕРОДНЫМИ НАНОТРУБКАМИ И ТЕРМОРАСШИРЕННЫМ ГРАФИТОМ

**^aБаскакова К. И., ^bДорожкин К.В., ^{a, b}Седельникова О.В., ^bСусяев В.И.,
^aБулушева Л.Г., ^aОкотруб А.В.**

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

*^bНациональный исследовательский Томский государственный университет, Томск,
Россия*

Полимерные композиционные материалы (ПКМ) с углеродными наноструктурами демонстрируют высокие значения электропроводности и хорошую экранирующую способность в микроволновом и терагерцовом диапазонах частот при низких концентрациях наполнителя. Однако особенности частотной дисперсии диэлектрической проницаемости композитов, в которых наблюдается электрическая перколяция, не позволяют получить материал, эффективно ослабляющий электромагнитное излучение в высокочастотном диапазоне. Для создания частотно избирательных элементов необходимо добиться резонансного взаимодействия материала с высокочастотным электромагнитным полем, что возможно при формировании композиционного периодического каркаса.

Технология 3D-печати, позволяющая быстро и малозатратно создавать объекты сложной геометрии, открывает перспективы для настольной печати пассивных элементов высокочастотной оптики и прототипирования защитных покрытий. Это актуально для коммуникации, теле- и радиовещания, GPS, мобильной связи и др.

В данной работе исследованы ПКМ с разным содержанием однослойных углеродных нанотрубок и терморасширенного графита, полученные методом 3D-печати по технологии цифровой светодиодной проекции. Получены прототипы частотных фильтров в виде композиционных периодических каркасов. Проведено систематическое исследование зависимости частотных характеристик композиционных периодических каркасов от геометрии и состава. Установлено, что минимумы пропускания полученных материалов регулярно смещаются в сторону меньших частот при увеличении периода каркасов. Эффективность поглощения прошедшей волны увеличивается с увеличением слойности каркаса и доли наполнителя.

ПЛАЗМОХИМИЧЕСКОЕ ОСАЖДЕНИЕ ИЗ ГАЗОВОЙ ФАЗЫ АЛМАЗНЫХ ПЛЕНОК, ДОПИРОВАННЫХ АЗОТОМ

**Баскакова К. И., Самусов И.А., Городецкий Д.В., Федосеева Ю.В.,
Седельникова О.В., Булушева Л.Г., Окотруб А.В.**

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

Алмаз, благодаря своим уникальным физико-химическим свойствам, таким как высокая твердость, химическая инертность, износостойкость, высокая электро- и теплопроводность, имеет широкое применение в различных областях. Легирование азотом алмаза приводит изменению проводимости и оптических свойств. Благодаря этому, легированный азотом алмаз может использоваться в качестве эмиттера в различных устройствах, а также открывает новые пути развития микро- и нанoeлектроники.

Методом плазмохимического газофазного осаждения (PE CVD) на кремниевых подложках были выращены алмазные пленки с разным значением концентрации азота. Рост алмазных пленок осуществлялся в микроволновом плазменном реакторе пониженного давления без автономного подогрева подложки. Генерация плазмы осуществлялась микроволновым излучением частотой 2,45 ГГц мощностью 5 кВт. Рабочее давление в камере составляло 120 Тор. Основным плазмообразующим газом служил водород. В качестве углеродосодержащего газа использовался пентан. Скорость потока газообразного азота составляла 30 мл/мин.

Было исследовано влияние азота на морфологию алмазных пленок. По результатам анализа микрофотографий растровой электронной микроскопии, спектров фотolumинесценции, комбинационного рассеяния света и рентгеновских фотоэлектронных спектров было установлено, что встраиванием азота в структуру алмаза приводит к уменьшению зерна кристаллита алмазной пленки и появлению дополнительных дефектов структуры. В спектрах фотolumинесценции недопированных алмазных пленок была обнаружена широкая полоса с максимумом около 500 нм. Большое количество дефектов в структуре пленки, полученной при потоке азота 30 мл/мин, объясняет отсутствие фотolumинесценции в этой области.

Исследование выполнено при поддержке РФФИ, грант № 22-72-10097.

ВЛИЯНИЕ ДИНАМИЧЕСКОЙ ДИФРАКЦИИ НА ВОЗБУЖДЕНИЕ И РАСПРОСТРАНЕНИЕ ПЛАЗМОН-ПОЛЯРИТОНОВ В ГРАФЕНЕ

Батраков К.Г.

НИУ «Институт ядерных проблем» БГУ, Минск, Беларусь

Сильное замедление плазмон-поляритонов (ПП) в углеродных нанотрубках было впервые предсказано в [1]. Замедление в графене и слоистых графеновых структурах исследовалось в [2,3]. В частности, было показано, что двухслойные структуры поддерживают симметричные и асимметричные моды, структуры с количеством слоев больше двух - симметричные и гибридные моды. Симметричные моды характеризуются тем, что эффективный химический потенциал, определяющий взаимодействие графеновой электронной системы с излучением, равен сумме химических потенциалов составляющих структуру слоев. Это позволяет осуществлять как плавную, так и дискретную перестройку частот и интенсивности взаимодействия структуры с электромагнитным полем. Асимметричные (гибридные) моды характеризуются сильным замедлением, вплоть до равенства фазовой скорости волны ферми скорости электронов графена $\sim c/300$. Кроме того, коэффициент замедления асимметричных (гибридных) мод зависит от расстояния между слоями, что открывает дополнительные возможности перестройки. В плоскопараллельной слоистой структуре, однородной вдоль направлений плоскости графена, замедленный (поверхностный) ПП внешней падающей волной возбудить невозможно. В данной работе исследуется возбуждение ПП падающей волной за счет явления брэгговской дифракции в периодической среде. Пространственная периодичность может быть создана как путем модуляции графена (например, модуляцией его химического потенциала), так и путем добавления в структуру дифракционной решетки. В работе показано, что условиям возбуждения ПП, связывающим частоту с углом падения волны и параметрами графена, соответствует пик в линии поглощения. Это свойство можно использовать при разработке перестраиваемых детекторов излучения. В работе также рассматриваются вопросы распространения и генерации электронным пучком ПП в графеновой структуре в условиях дифракции.

Библиографические ссылки

1. Slepyan G.Y. et. al. / Physical Review B. 1999. Vol. 60 (24). P. 17136.
2. Batrakov K.G., Saroka V.A., Maksimenko S.A. / J. Nanophot. 2012. Vol. 6 (1). P. 061719.
3. Batrakov K., Maksimenko S. / Phys. Rev. B. 2017. Vol. 95 (20). P. 205408.

ГИСТЕРЕЗИС И СТАТИСТИКА ОПТИЧЕСКОГО ИЗЛУЧЕНИЯ ГРАФЕНОВЫХ КВАНТОВЫХ ТОЧЕК

**^aБелько Н.В., ^aЧижевский В.Н., ^bКулагова Т.А., ^{a, b}Пархоц М.В., ^{a, b}Лепешкевич С.В.,
^aМогилевцев Д.С.**

^aГНУ «Институт физики имени Б.И. Степанова» НАНБ, Минск, Беларусь

^bНИУ «Институт ядерных проблем» БГУ, Минск, Беларусь

Графеновые квантовые точки (ГКТ) являются водорастворимым биосовместимым наноматериалом с типичным размером частиц ~ 5 нм и управляемыми оптическими свойствами [1]. ГКТ весьма перспективны для биомедицинских применений. Существуют примеры использования ГКТ для детектирования различных ионов и биогенных молекул, в качестве флуоресцентных маркеров [1]. Кроме того, ГКТ могут рассматриваться в качестве флуорофоров для некоторых методов флуоресцентной микроскопии сверхвысокого разрешения. К таким методам относится, например, оптическая флукуационная микроскопия, где повышение разрешающей способности достигается за счет обработки данных и не требует усложнения регистрирующей аппаратуры. Флуорофоры для такой микроскопии должны демонстрировать «мерцания» (случайные переключения между состояниями с интенсивной и слабой либо отсутствующей флуоресценцией), при этом необратимое выгорание является нежелательным. В данной работе изучается потенциал применения ГКТ в качестве флуорофоров для оптической диагностики и сверхразрешающей микроскопии. Нами исследованы ГКТ, сформировавшие агрегаты на кремниевой подложке либо введенные в полимерные матрицы. Флуоресценция образцов возбуждалась при помощи полупроводникового лазера с длиной волны 450 нм. Сигнал флуоресценции квантовых точек регистрировался при помощи детектора одиночных фотонов с пятна на образце диаметром 0,2 мм.

Все исследованные образцы демонстрируют флуоресценцию в диапазоне 500–700 нм, при этом микроокружение влияет на форму спектра флуоресценции ГКТ. Под действием непрерывного лазерного излучения наблюдается снижение интенсивности флуоресценции со временем, что может объясняться «мерцаниями» отдельных квантовых точек [2]. После прекращения облучения наблюдается постепенное восстановление сигнала. При возбуждении флуоресценции ГКТ треугольными импульсами длительностью 20–200 с наблюдается гистерезис в зависимости интенсивности флуоресценции от плотности мощности возбуждающего излучения. Возбуждение флуоресценции ГКТ непрерывным излучением либо треугольными импульсами и исследование временного отклика позволяют получить информацию о «мерцаниях» отдельных частиц без использования сложного оборудования. ГКТ как в агрегированном состоянии, так и в полимерных матрицах демонстрируют аналогичный временной отклик интенсивности флуоресценции на непрерывное или импульсное возбуждение. Таким образом, затухание сигнала флуоресценции в процессе облучения не зависит от состояния агрегации ГКТ или микроокружения и, следовательно, характеризует отдельные частицы. Статистика фотонов во флуоресценции от всех исследованных образцов соответствует экспоненциальному распределению. Данное наблюдение указывает на пуассоновскую статистику в испускании, типичную для ансамбля независимых излучателей.

Полученные результаты указывают на потенциальную возможность применения ГКТ в качестве флуорофоров для визуализации оптических флукуаций в биоструктурах со сверхвысоким разрешением (SOFI).

Библиографические ссылки

1. Henna T.K., Pramod K. / Mater. Sci. Eng. C. 2020. P. 110651.
2. Belko N. et. al. / J. Phys. Chem. C. 2022. Vol. 126. P. 10469–10477.

ОЦЕНКА ОДНОРОДНОСТИ КОМПОЗИТОВ НА ОСНОВЕ МУНТ С РАЗЛИЧНОЙ КОНЦЕНТРАЦИЕЙ И ВРЕМЕНЕМ УЛЬТРАЗВУКОВОЙ ОБРАБОТКИ

Бердюгин А.И., Бадьин А.В., Гурский Р.П., Шематило Т.Н., Дорожкин К.В.

Национальный исследовательский Томский государственный университет, Томск, Россия

Последние десятилетия активно ведётся изучение композитных материалов с углеродными включениями, в частности многостенными углеродными нанотрубками (МУНТ), которые позволяют повысить механические, физико-химические и электрические [1] свойства при той же удельной плотности материала. При этом необходимым условием является однородное распределение нановключений. Для оценки этого параметра используют систему терагерцовой (ТГц) визуализации [2].

В данной работе рассматриваются образцы, изготовленные из эпоксидной смолы и с 1 и 3 масс. % МУНТ при разном времени ультразвуковой (УЗ) обработки. При помощи ТГц спектрометра СТД-21 была определена диэлектрическая проницаемость образцов (рис. 1), а с помощью системы ТГц визуализации оценена их однородность (рис. 2).

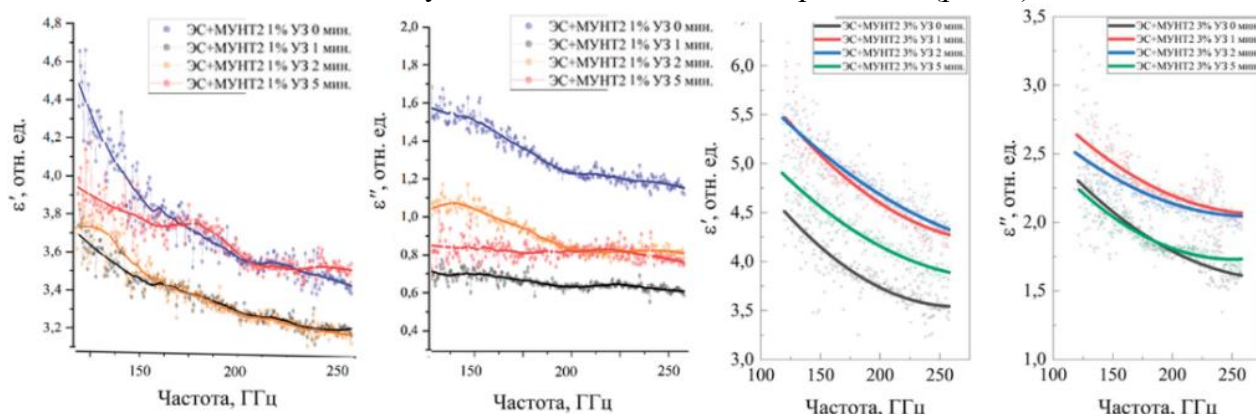


Рисунок 1. Частотные зависимости диэлектрической проницаемости образцов на основе МУНТ

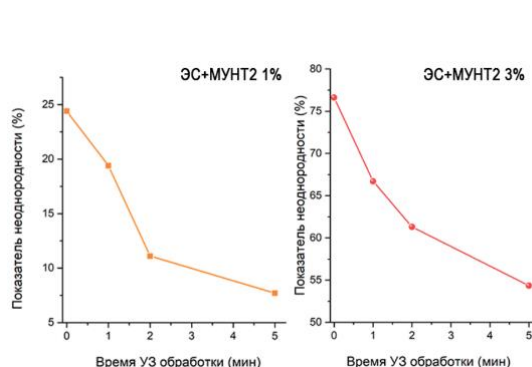


Рисунок 2. Зависимость неоднородности образцов от времени УЗ обработки

В результате были получены значения неоднородности для образцов с УЗ 0, 1, 2 и 5 мин., которые равны для МУНТ 1% масс: 24,4%; 19,4%; 11,1%; 7,7%, а для 3% масс: 76,6%; 66,7%; 61,3%; 54,3%, соответственно. Таким образом, чем дольше композит подвергается УЗ обработке, тем меньше агломератов и пустот образуется в образце. В свою очередь, диэлектрическая проницаемость растёт с увеличением времени УЗ обработки, однако на 5 минутах она падает, что вероятно объясняется разрушением МУНТ.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 22-29-20248, <https://rscf.ru/project/22-29-20248/> и средств Администрации Томской области.

Библиографические ссылки

1. Zaghloul M.M. et. al. / Polymer Testing. 2017. Vol. 63. P. 467–474.
2. Badin A.V. et. al. / IRMMW-THz. 2021. P. 1–2.

ГРАФЕНОВЫЕ КВАНТОВЫЕ ТОЧКИ ДЛЯ АДРЕСНОЙ ДОСТАВКИ ЛЕКАРСТВЕННЫХ ВЕЩЕСТВ

**^{a,b}Богданова А.В., ^{a,c}Денисов А.А., ^bКулагова Т.А., ^aКузнецова Т.Е., ^aТокальчик Д.П.,
^aПашкевич С.Г., ^aГубкин С.В.**

^aИнститут физиологии НАНБ, Минск, Беларусь

^bНИУ «Институт ядерных проблем» БГУ, Минск, Беларусь

^cБелорусский государственный университет, Минск, Беларусь

Графеновые квантовые точки (ГКТ) принадлежат к семейству углеродных точек, обладают сверхмалыми размерами, настраиваемой и сильной флуоресценцией, превосходной фотостабильностью, низкой токсичностью, а также высокой биосовместимостью. В последние годы ГКТ активно исследуются для применения в таких областях биомедицины, как биоимиджинг, тераностика и адресная доставка лекарств, в качестве замены органических красителей и неорганических полупроводниковых флуорофоров на основе квантовых точек, которые обладают высокой цитотоксичностью и склонностью к фотообесцвечиванию. Преимуществами ГКТ также являются их размер и легко модифицируемая поверхность, что делает их идеальными кандидатами для доставки лекарств через гематоэнцефалический барьер (ГЭБ) и кровотока. Исследовано, что ГКТ обладают способностью преодолевать ГЭБ, преимущественно за счёт механизма пассивной диффузии, что может найти применение в области нейрофизиологических исследований, диагностики и терапии. В данной работе целью исследования стало взаимодействие ГКТ со структурами нервной ткани крысы *in vivo*.

Для оценки проникновения и накопления ГКТ (Sigma, USA) в нервной ткани были использованы крысы линии Wistar. ГКТ вводили двумя способами: интраназально и внутрибрюшинно, в концентрациях 1 мг/мл и 100 мкг/мл. Флуоресцентную визуализацию ГКТ в поперечных срезах мозга крыс и мазках ткани большого сальника висцеральной брюшины проводили на 20 день при использовании флуоресцентного микроскопа Nikon Eclipse Ti2.

При интраназальном введении ГКТ в концентрациях 1 мг/мл и 100 мкг/мл в поперечных срезах обонятельных луковиц и гиппокампа обнаружена флуоресценция при возбуждении с длиной волны 470 нм, что свидетельствует о локализации ГКТ в данной области. Получено, что ГКТ распределяются гетерогенно в нервной ткани крыс, причем наиболее выражено данный эффект проявляется в структурах обонятельной луковицы. Интенсивность флуоресценции в исследуемых образцах была выше, чем в срезах мозга контрольных крыс. На основе флуоресцентной микроскопии мазков ткани большого сальника висцеральной брюшины крысы при внутрибрюшинном введении ГКТ аккумуляирования наноматериалов в жировой ткани не выявлено. Данные результаты подтверждают проникновение исследуемых ГКТ через ГЭБ. Также получено, что концентрация ГКТ не влияет на качество их визуализации в нервной ткани крыс. Изменения состояния животных после введения ГКТ не выявлено.

На основании полученных результатов можно утверждать, что исследуемые ГКТ способны мигрировать в мозг через биологические барьеры и накапливаться в различных отделах мозга. Химическая стойкость и биосовместимость ГКТ по сравнению с рядом других типов квантовых точек, отработанные методы модификации поверхности различными лигандами для придания им определенных функциональных свойств открывают возможности для их применения при решении различных биомедицинских задач. Превосходные флуоресцентные характеристики графеновых наноматериалов, а также их способность преодолевать биологические барьеры делают их весьма перспективными в качестве тераностических агентов для лечения нейродегенеративных и онкологических заболеваний.

ВЛИЯНИЕ ПРЕКУРСОРА-ДОНОРА АЗОТА НА СПЕКТРАЛЬНЫЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ БОР-НИТРИДНЫХ КВАНТОВЫХ ТОЧЕК

Богданова А.В., Голубева Е.Н., Демиденко М.И., Кулагова Т.А.

НИУ «Институт ядерных проблем» БГУ, Минск, Беларусь

Нитрид бора, состоящий из чередующихся атомов бора и азота, образующих насыщенные шестичленные циклы, обладает графито- и графеноподобной структурой. Наибольший интерес представляют бор-нитридные квантовые точки (БНКТ), которые обладают хорошей флуоресценцией, способностью существовать в виде стабильных водных суспензий и являются источником изотопов ^{10}B . Данные свойства демонстрируют перспективные возможности применения БНКТ для тераностики различных заболеваний, биоимиджинга и управляемой доставки лекарств. Также БНКТ рассматривают как новые борсодержащие препараты для эффективной бор-нейтронозахватной терапии. Помимо этого, БНКТ могут быть использованы как челнок для направленного транспорта противоопухолевых препаратов, таких как доксорубицин и паклитаксел, а также регуляции их внутриклеточного высвобождения [1].

Биоприменение БНКТ предопределяет особые требования к структурным и фотофизическим свойствам наночастиц. Актуальным является разработка методов синтеза небольших и однородных по размеру, водорастворимых, с высоким значением квантового выхода флуоресценции БНКТ. Такие наноматериалы могут быть синтезированы методом «снизу-вверх» с использованием различных прекурсоров азота и бора. Варьирование молекулярной структуры соединений азота (азотсодержащих прекурсоров) позволяет легировать в БНКТ гетероатомы, такие как сера, кислород, что может значительно изменить фотофизические свойства наноматериалов.

В данном исследовании БНКТ были синтезированы гидротермальным методом с использованием борной кислоты, в качестве прекурсора атомов бора, и двух прекурсоров-доноров азота: мочевины (БНКТ_1) и тиомочевины (БНКТ_2). Синтез наночастиц проводили в гидротермальном реакторе с тефлоновым покрытием при 200°C в течение 12 часов. Для исследования спектрально-люминесцентных свойств синтезированных БНКТ были проанализированы спектры поглощения, возбуждения и флуоресценции.

Установлено, что максимум поглощения БНКТ_1 составляет 265 нм. При возбуждении на 375 нм регистрируется спектр люминесценции с максимумом при 430 нм. При исследовании БНКТ_2 максимум поглощения регистрируется при 290 нм. Флуоресценция БНКТ_2 на 425 нм не зависит от длины волны возбуждения и является максимальной при 330 нм. Выявлено, что интенсивность поглощения и испускания остается стабильной в течение 15 дней.

Использование тиомочевины в качестве прекурсора-донора азота должно обеспечить встраивание атомов серы в нанокристаллическую структуру БНКТ и привести к изменению спектрально-люминесцентных характеристик наночастиц. Наши результаты показали, что варьирование прекурсора-донора азота с целью встраивания атома серы при гидротермальном синтезе БНКТ вызывает незначительные различия в спектральных свойствах наночастиц.

Библиографические ссылки

1. Hashemzadeh H., Raissi H. / J. Biomol. Struct. Dyn. 2020. Vol. 39. P. 5613–5618.

РЕШЕТЧАТАЯ СТРУКТУРА НА ОСНОВЕ ФТОРИРОВАННОГО ГРАФЕНА В КАЧЕСТВЕ ПОЛЯРИЗАТОРА ТГц ИЗЛУЧЕНИЯ

**^a Волынец Н.И., ^a Поддубская О.Г., ^b Сысоев В.И., ^b Городецкий Д.В.,
^b Булушева Л.Г., ^b Окотруб А.В.**

^a НИУ «Институт ядерных проблем» БГУ, Минск, Беларусь

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

В последние годы разработка и создание легких инертных «полностью углеродных» и прочных терагерцовых компонент с контролируемым набором свойств, которые могут быть созданы за один технологический цикл, представляют наибольший интерес. При этом получение тонкопленочных оптических элементов для эффективного управления поляризационными характеристиками электромагнитного излучения ТГц диапазона также является актуальной задачей.

Перспективным материалом для создания таких компонент является фторированный графен (ФГ) – материал, обладающий уникальными электронными свойствами, в котором определенная часть атомов углерода соединена со фтором. Одним из способов формирования решетчатой структуры на основе фторированного графена, эффективно взаимодействующей с падающим излучением ТГц диапазона, является ультрафиолетовое лазерное профилирование, приводящее к восстановлению проводящих свойств исходно диэлектрического фторированного графена, сохраняя углеродный каркас. Таким образом, была получена решетчатая структура графен/фторированный графен с различными ширинами восстановленной лазером и невосстановленной областей ФГ.

Электромагнитные свойства таких решетчатых структур были исследованы в диапазоне частот 0.1 – 1 ТГц методом время разрешенной ТГц спектроскопии. Спектры прохождения решетчатых структур были измерены для двух различных поляризаций падающего ТГц излучения. В случае ТЕ-поляризованной волны спектр прохождения имеет резонансный пик, частотное положение которого смещается в сторону высоких частот при уменьшении ширины восстановленной области. При этом, для ТМ-поляризованной волны уровень прохождения решетчатых структур уменьшается с ростом частоты. Таким образом, полученные структуры могут быть использованы для создания поляризационно-чувствительных ТГц компонент.

АНОДНО-ОКСИДНАЯ НАНОСТРУКТУРА, СФОРМИРОВАННАЯ АНОДИРОВАНИЕМ ДВУХСЛОЙНОЙ СИСТЕМЫ Al/Nb, ДЛЯ ПРИБОРНЫХ ПРИЛОЖЕНИЙ СВЧ ТРУБЧАТОЙ КАЛОРИМЕТРИИ

Гога А.В., Тумилович А.А., Позняк А.А., Завадский С.М., Бычек И.В., Плиговка А.Н.

*Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники,
Минск, Беларусь*

Актуальными проблемами калориметрического измерения СВЧ мощности в трубчатых волноводах являются снижение чувствительности и увеличение времени отклика при росте частоты излучения, вызванных наличием в калориметре объемного теплоемкого термочувствительного элемента, увеличивающего тепловую инерционность системы [1]. Эти проблемы могут быть решены применением термочувствительного элемента в тонкопленочном исполнении без использования подложки. В качестве основы для такого исполнения может быть использована анодно-оксидная наноструктура (АОН), сформированная анодированием двухслойной системы Al/Nb. ВАХ АОН показала нелинейный и симметричный вид, ТКС – отрицательное значение, $-1,28 \cdot 10^{-2} \text{ K}^{-1}$, что говорит о ее полупроводниковых и термочувствительных свойствах [2]. Это позволяет сформировать термочувствительный элемент для калориметрического измерения СВЧ мощности на основе АОН в тонкопленочном исполнении без использования объемной теплоемкой подложки, что является актуальной задачей.

В данной работе методом анодирования двухслойной системы Al/Nb и селективного травления была сформирована тонкопленочная АОН без использования кремниевой подложки.

Ниобиевую пленку толщиной 200 нм наносили методом магнетронного распыления на полированную алюминиевую фольгу (99,99%) толщиной 10 мкм. Двухстороннее гальваностатическое анодирование проводили в горизонтальной фторопластовой ячейке в 1 М водном растворе щавелевой кислоты при плотности тока $12 \text{ mA} \cdot \text{cm}^{-2}$. Гальваностатическое реанодирование осуществляли в смеси 0,5 М борной кислоты и 0,05 М тетрабората натрия разворачивая напряжения до напряжения 220 В при плотности тока $300 \text{ mA} \cdot \text{cm}^{-2}$. Селективное травление анодного оксида алюминия (АОА) производили в смеси 10 %-ной фосфорной кислоты и 1,12 М хромового ангидрида. Морфологию АОН исследовали при помощи сканирующего электронного микроскопа Hitachi S-806.

Полученная АОН представляла собой матрицу АОА, заполненную наностолбиками оксида ниобия (ОН), расположенными на сплошном слое проводящего ОН, под которым находился тонкий слой металлического ниобия и толстый слой плотного ОН, так как анодирование было двухсторонним. Селективное удаление АОА планаризовало АОН и открыло верхушки наностолбиков ОН для напыления никелевых контактов площадок. Морфологические параметры АОН: высота, диаметр и межстолбиковое расстояние составляли 160, 20, 80 нм соответственно; толщина АОА – 120 нм, следовательно, верхушки наностолбиков ОН выступали из пористой матрицы АОА на ~40 нм; толщина сплошного слоя проводящего ОН – 110 нм, толщина плотного ОН – 250 нм, толщина находящегося между ними металлического ниобия – 40 нм.

Таким образом, была показана возможность формирования тонкопленочной АОН без использования объемной теплоемкой подложки методом анодирования двухслойной системы Al/Nb, общая толщина которой составляла 565 нм.

Библиографические ссылки

1. Proc. 13th Int. Symp. on Space THz Technol. 2002. Vol. 13. P. 301–307.
2. IEEE Transactions on Nanotechnology. 2002. Vol. 18. № 125. P. 352–361.

ПРОГРАММИРУЕМОЕ СООСАЖДЕНИЕ НАНОСТРУКТУРИРОВАННОГО AZO ДЛЯ СОЗДАНИЯ МУЛЬТИСЕНСОРНЫХ ГАЗОАНАЛИТИЧЕСКИХ СИСТЕМ

^aГойхман Б.В., ^aФедоров Ф.С., ^bСимоненко Н.П., ^bСимоненко Т.Л., ^{b,c}Фисенко Н.А.,
^aДубинина Т.С., ^aОвчинников Г., ^dЛанцберг А.В., ^eЛипатов А., ^bСимоненко Е.П.,
^{a,f}Насибулин А.Г.

^aСколковский институт науки и технологий, Москва, Россия

^b Институт общей и неорганической химии им. Н. С. Курнакова РАН, Москва, Россия

^cРоссийский химико-технологический университет им. Д. И. Менделеева, Москва, Россия

^dМосковский государственный технический университет им. Н. Э. Баумана,
Москва, Россия

^eГорно-технологический колледж Южной Дакоты, Рэпид-Сити, США

^fУниверситет Аальто, Аальто, Финляндия

Считается, что мультисенсорные системы, типа «электронный нос», главным образом решают проблему селективного определения запаха или аналита. Несмотря на то, что такие системы обеспечивают различение близких гомологов и изомеров, они требуют предварительного «обучения», в рамках которого получаемый векторный сигнал, связанный с анализируемым веществом, проецируется в искусственное пространство образов.

В данном исследовании мы впервые протестировали метод программируемого совместного осаждения для синтеза оксида цинка, легированного алюминием (AZO). Способ позволяет осаждать AZO с высокой точностью целевого химического состава, $ZnO - 1,5\% Al_2O_3$. Материал кристаллизуется в виде тонких пористых хлопьев, состоящих из нанокристаллов со слегка искаженной структурой вюрцита [1].

Синтезированный материал показывает высокий, до 0,87, хеморезистивный сенсорный отклик на пары спиртов, 0,9 ppm, в воздухе при 300 °C с пределом обнаружения на уровне нескольких ppm и даже ppm. Полученные сенсоры показывают хорошую стабильность хеморезистивного отклика, а также низкое время отклика. В работе мы подтвердили прямую зависимость величины чувствительности AZO от молекулярной массы анализируемого вещества для *n*-спиртов. Используя метод главных компонент и алгоритм машинного обучения *Random Forest*, было продемонстрировано не только селективное распознавание близких гомологов и изомеров спиртов, но и возможность их обнаружения без предварительного «обучения» мультисенсорной системы - сопоставляя молекулярные «отпечатки пальцев» данных аналитов из баз данных Mol2vec и PubChem с получаемым векторным сигналом.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 21-73-10288, <https://rscf.ru/project/21-73-10288/>.

References

1. Goikhman B.V. et. al. / J. Mater. Chem. A. 2022. Vol. 10. P. 8413-8423.

ФОРМИРОВАНИЕ СТРУКТУРИРОВАННЫХ МАССИВОВ УНТ С ЛОКАЛЬНЫМ РАСПРЕДЕЛЕНИЕМ МИКРОКРИСТАЛЛОВ АЛМАЗОВ ПО ПОВЕРХНОСТИ

**Городецкий Д.В., Седельникова О.В., Кондранова А.М., Баскакова К.И., Гурова О.А.,
Шляхова Е.В., Булушева Л.Г., Окотруб. А.В.**

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

Углеродные гибридные материалы обладают совокупностью свойств входящих в их состав компонент и имеют перспективу использования в разнообразных электронных устройствах вычислительной, силовой и вакуумной электронике. Интересной комбинацией является сочетание углеродных нанотрубок (УНТ) и алмаза. В этом случае наблюдается взаимодействие sp^2 - и sp^3 -гибридизованного углерода, обладающего различными физико-химическими свойствами, такими как электро- и теплопроводность, механическая прочность, химическая инертность. Таким образом, сочетание диэлектрических и оптических свойств алмаза с высокой электропроводностью УНТ делает гибриды УНТ/алмаз привлекательными для разработки локальных люминесцентных источников света, теплопроводов для интегральных компонентов и стабильных автоэлектронных эмиттеров.

Методом плазмохимического газофазного осаждения (PECVD) на кремниевых подложках были выращены гибридные пленки УНТ/алмаз при разной мощности СВЧ-излучения и разной продолжительности синтеза. Синтез алмазных пленок проводился в микроволновом плазменном реакторе пониженного давления (частота 2,45 ГГц мощность 3 кВт) без автономного подогрева подложки. Рабочее давление в камере составляло ~110 мбар. В качестве углеродосодержащего газа использовались пары пентана в водороде. Массивы многослойных УНТ были заранее профилированы излучением твердотельного импульсного лазера с длиной волны 1064 нм.

Установлено, что при мощности СВЧ-излучения 3 кВт формируются низкодефектные алмазные кристаллиты со средним размером ~ 20 мкм. Предварительное лазерное профилирование массива УНТ позволяет создавать структуры с заданным распределением кристаллов алмаза по поверхности.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 22-72-10097, <https://rscf.ru/project/22-72-10097/>.

ВЛИЯНИЕ МОДИФИКАЦИИ УГЛЕРОДНЫХ НАНОТРУБОК ЧАСТИЦАМИ Ag НА ЭЛЕКТРОМАГНИТНЫЕ СВОЙСТВА НАНОУГЛЕРОДНЫХ КОМПОЗИТОВ

^aГорохов Г.В., ^aОрловский А.В., ^aСидорик Н.Н., ^aМейсак Д.Н., ^{b, c}Голубцов Г.В.,
^bСелютин А.Г., ^bИщенко А.В., ^{b, c}Казакова М.А.

^aНИУ «Институт ядерных проблем» БГУ, Минск, Беларусь

^bИнститут катализа СО РАН, Новосибирск, Россия

^cНовосибирский государственный университет, Новосибирск, Россия

Сочетание уникальных механических, термических или электромагнитных свойств и возможности переработки стандартными производственными методами для создания конечных изделий делает полимерные композиционные материалы перспективными для широкого спектра применений, включая построение элементов микроволновой и терагерцовой оптики и обеспечение электромагнитной совместимости. Выраженное влияние характера распределения частиц наполнителей в композите на его электромагнитные свойства [1], совершенствование методик распределения включений в матрице композита представляет существенный научный и практический интерес.

В рамках данной работы были рассмотрены композиты на основе полиметилметакрилата (ПММА), содержащие окисленные многостенные углеродные нанотрубки (МУНТ-Ох), модифицированные различными концентрациями наночастиц Ag. Серии композитов с концентрацией МУНТ ниже и выше порога перколяции были получены методом коагуляционного соосаждения в виде порошка. Плёнки толщиной 320 – 380 мкм получались методом горячего прессования порошка композита.

С помощью низкочастотной диэлектрической спектроскопии было показано, что для серии с содержанием МУНТ-Ох 4 % (приближающейся, но не достигающей порога перколяции) модификация нанотрубок наночастицами Ag в концентрации свыше 0.2 масс. % приводит к возникновению макроскопической проводимости композита. Для серии с содержанием 10 масс.% МУНТ-Ох (существенно выше порога перколяции), модификация 1.5 и 2.5 масс. % Ag привела к монотонному увеличению проводимости в пределах одного порядка. Данные эффекты связаны с улучшением дисперсии нанотрубок в полимере вследствие их модификации наночастицами Ag.

В микроволновом диапазоне частот электромагнитные свойства композитов, содержащих Ag/МУНТ-Ох, становятся сопоставимы с таковыми для МУНТ-Ох монокомпозиций, поскольку при указанных частотах преобладает вклад поляризуемости отдельных включений.

Таким образом, модификация МУНТ наночастицами Ag вносит наиболее существенный вклад в низкочастотной области, однако слабо отражается на высокочастотных диэлектрических параметрах композита. Ввиду существенных величин комплексной диэлектрической проницаемости, рассмотренные композиты можно считать перспективными с точки зрения экранирования микроволнового излучения.

«Исследование выполнено при финансовой поддержке БРФФИ в рамках научного проекта Ф21РМ-022 и РФФИ в рамках научного проекта № 20-53-04008».

Библиографические ссылки

1. Елецкий А.В. [и др.]. / Успехи физических наук. 2015. № 3 (185). С. 225–270.

ИССЛЕДОВАНИЕ СТРУКТУРНЫХ ОСОБЕННОСТЕЙ ФТОРИРОВАННОГО ГРАФИТА С ВНЕДРЁННЫМИ МОЛЕКУЛАМИ АЦЕТОНИТРИЛА НА ОСНОВЕ ИЗМЕРЕНИЯ ДИЭЛЕКТРИЧЕСКИХ И МАГНИТНЫХ ХАРАКТЕРИСТИК

Гребёнкина М.А., Гусельников А.В., Булушева Л.Г., Лавров А.Н., Окотруб А.В.

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

Фторированный графит с внедрёнными в межслоевое пространство молекулами интересен для приложений в электрохимии, газовых сенсорах и хранении активных веществ. Исследование диэлектрических и магнитных характеристик фторированного графита позволяет рассмотреть структуру материала с точки зрения подвижности внедрённых в межслоевое пространство молекул и зависимости от распределения атомов фтора по поверхности графеновых слоёв. В данной работе проводилось измерения диэлектрической проницаемости и магнитной восприимчивости фторированных графитов с внедрённым ацетонитрилом $C_2F_x \cdot CH_3CN$, где $0,07 < x < 1,05$. Температурная зависимость диэлектрической проницаемости (1 кГц, температурный диапазон $-180 - 25$ °С) показывает уменьшение величины диэлектрической проницаемости при температуре ниже -100 °С, что может быть связано с вымораживанием движения внедрённых молекул ацетонитрила. Диамагнитный вклад в магнитную восприимчивость $C_2F_x \cdot CH_3CN$ увеличивается при уменьшении x , парамагнитная составляющая при этом уменьшается, что может быть вызвано уменьшением степени фторирования образцов и образованием сопряжённых нефторированных участков. Также было обнаружено, что увеличение диамагнитного вклада начинается при $x < 0,6$. Подобная зависимость может быть связана с тем, что во фторированных графитах $C_2F_x \cdot CH_3CN$ с $x < 0,6$ присутствуют нефторированные островки, образованные несколькими гексагонами, что приводит к существенному увеличению диамагнетизма, а также появлению зависимого от температуры диамагнетизма, характерного для графита, в то время как для составов с $x > 0,6$ нефторированные участки в основном образованы цепочками атомов углерода в sp^2 -гибридизации.

ПРОЯВЛЕНИЕ МАГНИТНЫХ СВОЙСТВ В НЕСТЕХИОМЕТРИЧЕСКИХ ПЛЕНКАХ НЕЛЕГИРОВАННОГО $\text{SnO}_{2-\delta}$

^aДоросинец В.А., ^aСамарина М.А., ^aКсенович В.К., ^{a,b}Адамчук Д.В., ^cДорошкевич А.С.

^aБелорусский государственный университет, Минск, Беларусь

^bНИУ «Институт ядерных проблем» БГУ, Минск, Беларусь

^cОбъединенный институт ядерных исследований, Дубна, Российская Федерация

Важным направлением для развития спинтроники является получение полупроводниковых материалов, обладающих магнитными свойствами. Диоксид олова (SnO_2) является одним из перспективным материалов, позволяющим реализовать данную задачу. Как правило пленки SnO_2 проявляют диамагнитные свойства. Ферромагнетизм вплоть до комнатной температуры был обнаружен в нанокристаллитах SnO_2 , полученных золь-гель методом [1]. Однако для создания элементов спинтроники использование физических вакуумных технологических методов синтеза тонких пленок является более перспективным.

В данной работе приводятся результаты по исследованию магнитных свойств тонких пленок нестехиометрического диоксида олова $\text{SnO}_{2-\delta}$, полученных методом магнетронного напыления олова в плазме аргона. На первой стадии отжига пленки нагревались до температуры 200 °С и выдерживались при этой температуре в течение 2 часов. Затем на второй стадии проводился медленный нагрев пленок до температуры 375 °С с последующим изотермическим отжигом в течение 1 часа.

Для исследования структурных свойств полученных пленок использовались методы рентгеноструктурного анализа и спектроскопии комбинационного рассеяния света. Обнаружено, что на рентгенограммах пленок присутствуют рефлексы, характерные как для фазы SnO_2 , так и для фазы SnO . В спектрах комбинационного рассеяния света пленок не обнаружено узких линий, зарегистрированы только две широкие полосы в диапазоне около 50–200 и 400–700 см^{-1} , что обычно связывают с разупорядочением поверхности наноразмерных зерен.

Измерения намагниченности пленок SnO_2 были проведены с использованием вибрационного магнитометра, входящего в состав гелиевого криостата с замкнутым циклом охлаждения *Cryogenics Ltd.*, в температурном интервале 2–300 К в магнитных полях от 0 до 8 Тл. При построении кривых производилось вычитание диэлектрического вклада от стеклянной подложки. Для температур 10 К и выше для пленок характерно диамагнитное поведение, свойственное типичным металл-оксидным материалам. При дальнейшем понижении температуры при малых значения индукции магнитного поля B наблюдается ферромагнитное поведение, сменяющееся диамагнитным при увеличении индукции магнитного поля. Значение B_0 , при котором наблюдается переход от ферромагнитного к диамагнитному поведению, увеличивается при понижении температуры и составляет 1,83 и 2,23 Тл при температурах 4 и 2 К, соответственно. Кривые намагничивания пленок имеют безгистерезисный вид, что является характерной чертой d^0 -ферромагнетиков. Ферромагнитное поведение пленок $\text{SnO}_{2-\delta}$ можно связать с высокой концентрацией кислородных вакансий на границе нанокристаллитов SnO_2 и интерфейса SnO_2/SnO . Согласно теории [2] при образовании примесной зоны электронных состояний за счет вакансий кислорода возможно спиновое расщепление с образованием магнитных поляронов.

Библиографические ссылки

1. Morozov Ju.G. et. al. / Solid State Sciences. 2019. Vol. 126. P. 106854(31).
2. Coey J.M.D. / Nature Materials. 2019. Vol. 18. P. 652–656.

ИССЛЕДОВАНИЕ КОМПОЗИТНОГО ВОЛОКНА ДЛЯ 3D ПЕЧАТИ В ОТКРЫТОМ РЕЗОНАТОРЕ

**^аДорофеев И.О., ^бМосеенков С.И., ^аТетерина Д.Д., ^аДунаевский Г.Е., ^аСусляев В.И.,
^бКузнецов В.Л.**

*^аНациональный исследовательский Томский государственный университет,
Томск, Россия*

^бИнститут катализа СО РАН, Новосибирск, Россия

Одним из применений технологии аддитивной 3D печати является создание конструкций и объектов, имеющих заданные характеристики с точки зрения взаимодействия с электромагнитным излучением. Таким образом, в рамках одной технологии конструкция приобретает как необходимые механические, геометрические, так и электрофизические свойства.

Для этого создается специальное композитное волокно для принтеров аддитивной печати. В частности, на основе пластиков и многостенных углеродных нанотрубок (МУНТ). Создание волокна, конечно же, требует методов оценки его электрофизических параметров. Учитывая цилиндрическую форму волокна, их количество очень ограничено.

В данной работе рассмотрена возможность использования открытого резонатора (ОР). ОР работает в очень широком диапазоне частот, от гигагерцового до оптического, обладает достаточно разреженным спектром колебаний, позволяет свободно размещать и перемещать объект в резонансном пучке. К сложностям следует отнести проблемы построения адекватных математических моделей резонатора с объектом. Поэтому в подавляющем числе случаев ОР применяется для исследования объектов плоскопараллельной формы. Тем не менее, известно использование ОР для диагностики сверхтонких проводников. Здесь предлагается расширить данный подход на композитное волокно.

В качестве математической модели волокна в ОР используется модель тонкого протяженного цилиндра, разработанная для сверхтонких проводников [1]. Модель основана на разновидности метода возмущения ОР, реализованного с помощью теории возбуждения ОР заданным током [2].

Для экспериментальных исследований был выбран диапазон частот 8-16 ГГц. Измерительная установка была построена на основе ОР со следующими геометрическими параметрами: радиус вогнутости зеркал 30,4 см, их диаметр 28,65 см, длина резонатора 53,6 см, что соответствовало квазиоптической геометрии. Амплитудно-частотные характеристики резонатора измерялись с помощью анализатора цепей Agilent E8363B.

Из полученных результатов следует, что метод ОР позволяет исследовать свойства композиционных волокон для предельно низких концентраций МУНТ. Математическая модель метода ограничивает его применение только для действительной части комплексной диэлектрической проницаемости волокна. Метод имеет высокую разрешающую способность, с его помощью можно фиксировать небольшие отклонения в диэлектрической проницаемости образцов. При этом абсолютные значения диэлектрической проницаемости находятся в соответствии с результатами, полученными другими методами в пределах 10-15%.

Библиографические ссылки

1. Дорофеев И.О., Дунаевский Г.Е. / Изв. вузов, Физика, 2013. Т. 56. С. 43–48.
2. Вайнштейн Л.А. – М.: Сов. радио, 1966. – 474 с.

ВЛИЯНИЕ ВНЕШНЕГО МАГНИТНОГО ПОЛЯ НА ДИЭЛЕКТРИЧЕСКУЮ ПРОНИЦАЕМОСТЬ МАГНИТНЫХ ЖИДКОСТЕЙ

^{a,b}Доценко О.А., ^aЖуравлев В.А., ^aКосых Д.С.

^a*Национальный исследовательский Томский государственный университет,
Томск, Россия*

^b*Томский государственный университет систем управления и радиоэлектроники,
Томск, Россия*

В настоящее время в науке и промышленности наблюдается широкое исследование так называемых «умных» материалов, представителями которых являются магнитные жидкости. Быстрое время отклика на приложенное магнитное или электрическое поле и обратимое изменение демпфирующих свойств магнитных жидкостей могут использоваться в создании элементов электрических цепей нового поколения.

В работе представлены результаты измерений диэлектрической проницаемости двух видов магнитной жидкости: промышленно выпускаемого образца на основе керосина и образца, изготовленного в лабораторных условиях на основе глицерина. В качестве магнитной фазы в образцах используется магнетит.

Измерения емкости и активного сопротивления слоя магнитной жидкости проводились конденсаторным методом с помощью LCR измерителя Agilent E4980 в частотном диапазоне от 20 Гц до 2 МГц. Измерительной ячейкой являлся прямоугольный плоский конденсатор, изготовленный методом 3D печати. При расчетах действительной и мнимой частей диэлектрической проницаемости были учтены краевые эффекты, присутствующие в измерительной ячейке. Для этого перед измерением образцов проводилась калибровка измерительной установки. В качестве эталонных жидкостей использовались вода ($\epsilon = 81$ отн. ед. при 20 °С) и глицерин ($\epsilon = 47,5$ отн. ед. при 20 °С).

В процессе эксперимента измерительный конденсатор ориентировался во внешнем поле таким образом, что его пластины располагались параллельно или перпендикулярно линиям напряженности магнитного поля.

Для промышленно выпускаемой магнитной жидкости измерения проводились непосредственно после приобретения и спустя один и два года для наблюдения за эффектом старения.

Сравнение полученных частотных зависимостей для исходной магнитной жидкости и для магнитной жидкости, находящейся во внешнем поле, показало ярко выраженную реакцию на внешнее поле у образца магнитной жидкости непосредственно после покупки и через один год. При этом наблюдается уменьшение относительного изменения $\epsilon'(f)$ и увеличение относительного изменения $\epsilon''(f)$ с увеличением частоты при расположении пластин измерительного конденсатора перпендикулярно линиям напряженности внешнего магнитного поля. Этот результат можно использовать при изготовлении датчиков магнитного поля, в составе которых находится магнитная жидкость.

Полученные результаты также показали, что для образца магнитной жидкости, изготовленного два года назад, наблюдается немонотонная зависимость относительных изменений $\epsilon'(f)$ и появления на ней максимума, в то время как на $\epsilon''(f)$ не проявились изменения частотных зависимостей. Подобное поведение относительных изменений $\epsilon'(f)$ наблюдалось у изготовленного лабораторного образца магнитной жидкости и его можно связать с использованием в его составе микроразмерного магнетита. Из этого результата можно заключить, что при хранении происходит старение промышленно выпускаемой магнитной жидкости с образованием в ней микроразмерных агломератов из наночастиц. Таким образом, использование конденсаторного метода измерений магнитной жидкости позволяет определить ее внутреннюю структуру.

ИССЛЕДОВАНИЕ СВОЙСТВ УГЛЕРОДНЫХ ТОЧЕК, СИНТЕЗИРОВАННЫХ ГИДРОТЕРМАЛЬНЫМ И СОЛЬВОТЕРМАЛЬНЫМ МЕТОДАМИ

Егорова М.Н., Смагулова С.А.

Северо-Восточный федеральный университет, Якутск, Россия

Углеродные точки (УТ) – новый класс углеродных наноматериалов, которые благодаря своим уникальным свойствам, таким как яркая и настраиваемая фотолюминесценция, низкая цитотоксичность, высокая растворимость в воде и хорошая фотостабильность, вызвали в последние годы интенсивный интерес ученых всего мира. Углеродные точки представляют собой нульмерные квазисферические наночастицы с размерами менее 10 нм, состоящие из углеродного ядра и кислород- и азотсодержащих групп на его поверхности, таких как, карбоксильные, гидроксильные, амидные и карбонильные [1, 2]. Уникальные свойства и малый размер углеродных точек, способствуют их широкому применению в областях оптоэлектроники, катализа, биомедицины и др.

В данной работе были проведены гидротермальный и сольвотермальный синтезы углеродных точек из таких углеродных прекурсоров как глюкоза, сажа березовой коры, соки ягод, произрастающих в Якутии, лимонная кислота и п-фенилендиамин. Гидротермальный синтез проводился в воде, в то время как для сольвотермального синтеза использовались формамид, диметилформамид и толуол. Углеродные точки были легированы атомами азота, бора и фосфора, источниками которых выступали водный раствор аммиака, мочевины, борная кислота и ортофосфорная кислота. Синтез проводился в политетрафторэтиленовом автоклаве при разных температурах (160°C-200°C) и времени (10 мин-18,5 ч).

Были подобраны оптимальные технологические режимы гидротермального и сольвотермального синтезов. Установлено, что углеродные точки, синтезированные гидротермальным методом, люминесцируют в сине-зеленой области спектра (440-565 нм), синтезированные сольвотермальным – в желто-красной области спектра (565-625 нм). Методами сканирующей и просвечивающей электронной микроскопии показано, что средние размеры, синтезированных УТ составляют ~10-25 нм. Установлено, что УТ имеют на поверхности карбоксильные, карбонильные, гидроксильные, эфирные группы, а также азот в пиррольном и пиридиновом виде. Обнаружено, что легирование атомами азота увеличивает квантовый выход (КВ) люминесценции до 26%, легирование атомами бора сдвигает спектр люминесценции УТ в красную область спектра, а при легировании атомами фосфора фотолюминесценция УТ становится не зависимой от изменения длины волны возбуждения и КВ увеличивается до 46%. Выявлено, что при лазерной модификации с поверхности УТ уходят кислородсодержащие группы, что приводит к снижению интенсивности люминесценции УТ. Показана перспективность применения УТ для создания конвертеров света, невидимых чернил, оптоэлектронных устройств, а также в области биомедицины.

Работа выполнена при поддержке проекта ФСРГ 2020-2017 Государственного задания Минобрнауки России на 2020-2022 годы.

Библиографические ссылки

1. Xiao L., Sun H. / Nanoscale Horizons. 2018. Vol. 3. №. 6. P. 565-597.
2. Xiong Y. et al. / Nanoscale. 2017. Vol. 9. №. 32. P. 11730-11738.

ТЕРМОЦИКЛИРОВАНИЕ СВОБОДНО СТОЯЩИХ ПЛЕНОК УГЛЕРОДНЫХ НАНОТРУБОК КАК СПОСОБ ПОВЫШЕНИЯ СЕЛЕКТИВНОСТИ ГАЗОВЫХ СЕНСОРОВ НА ИХ ОСНОВЕ

Заманский К.К., Федоров Ф.С., Насибулин А.Г.

Сколковский институт науки и технологий, Москва, Россия

Однослойные углеродные нанотрубки (ОУНТ) активно изучаются в настоящее время в качестве газочувствительного материала [1], поскольку потребность в новых газовых сенсорах увеличивается с каждым годом [2]. Основные требования, предъявляемые к газовым сенсорам – высокие показатели чувствительности, селективности и стабильности [3]. Несмотря на крайне высокую газовую чувствительность углеродных материалов в общем (вплоть до определения единичных молекул) [4] и ОУНТ в частности [5], реальное применение сенсоров на основе углеродных нанотрубок ограничено. Одной из самых актуальных проблем сенсоров такого рода является их фундаментально низкая селективность [6]. Устройство одной из самых перспективных систем повышения селективности повторяет принципиальную схему работы обонятельной системы млекопитающих и заключается в использовании машинного обучения для распознавания паттернов сигнала, полученных на массиве слабоселективных газовых сенсоров [7].

Данная работа посвящена созданию газовых сенсоров с свободно стоящей архитектурой, обеспечивающей эффективный Джоулевый нагрев, и комбинированию циклической модуляции температуры (термоциклирования) сенсоров для генерации паттернов сенсорного отклика с использованием различных методов машинного обучения для селективного распознавания этих паттернов.

Термоциклируемое сенсорное устройство на основе тонкой пленки свободно стоящих одностенных углеродных нанотрубок позволяет различать примеси токсичных газов (NO_2 , H_2S , ацетон) в сухом воздухе в концентрациях на уровне десятков частиц на миллион (ppm) с точностью свыше 90% и определять абсолютные значения концентраций этих газов с точностью до ppm. Для распознавания газов были использованы метод главных компонент (PCA), метод ближайших соседей (kNN), метод на основе деревьев решений (Decision tree, CatBoost) и нейросети [8].

Библиографические ссылки

1. Schroeder V. et. al. / Chem. Rev. 2019. P. 599–663.
2. Mouly J., Damianos D., Delbos P. 2021.
3. Korotcenkov G. / Springer New York. 2013.
4. Jensen K., Kim K., Zettl A. / Nat. Nanotechnol. 2008. Vol. 3. 533–537.
5. Rigoni F. et. al. / Analyst. 2013. P. 7392–7399.
6. Llobet E. / Sensors Actuators B Chem. 2013. P. 32–45.
7. Schroeder V. et. al. / ACS Sensors 4. 2019. P. 2101–2108.
8. Dorogush A.V., Ershov V., Gulin A. / ArXiv Prepr. 2018.

ОПТИМИЗАЦИЯ УДЕЛЬНОЙ ЭЛЕКТРОПРОВОДНОСТИ РЕЗИСТИВНОГО ПОКРЫТИЯ КОЛЛЕКТОРНОГО ЭЛЕКТРОДА GEM-ДЕТЕКТОРА ДЛЯ КОМПЛЕКСА MPD NICA

^aЗур И.А., ^bФедотов А.С., ^aХарченко А.А., ^aФедотова Ю.А., ^cМовчан С.А.

^aНИИ «Институт ядерных проблем» БГУ, Минск, Беларусь

^bБелорусский государственный университет, Минск, Беларусь

^cОбъединенный институт ядерных исследований, Дубна, Россия

Пробой в газовых электронных умножителях (ГЭУ), используемых в ускорительных комплексах NICA (ОИЯИ) и LHC (CERN) для регистрации заряженных адронов и фотонов, приводят к ухудшению их быстродействия, деградации усилительного элемента и выходу из строя в последствии. Одним из методов повышения устойчивости ГЭУ к пробую является нанесение на электроды резистивных покрытий. В связи с этим, актуальной задачей является определение оптимальных электрофизических свойств покрытий, которые повысят стабильность работы и увеличат срок эксплуатации ГЭУ.

Предлагается математическая модель для описания протекания тока электронной лавины через резистивное покрытие в ГЭУ на основании системы уравнений:

$$\begin{cases} j = \sigma E + \frac{\partial D}{\partial t} + \frac{Q_{\max}}{t} \frac{1}{\sqrt{2}} \text{Exp} \left(\frac{t - \tau}{\sqrt{2} \tau} \right)^2 f(\vec{r}) \\ E = -\nabla \varphi, \quad D = \varepsilon_0 \varepsilon E, \quad \nabla \cdot j = -\frac{\partial q}{\partial t} \end{cases} \quad (1)$$

где φ – потенциал, E и D – векторы напряжённости и смещения электрического поля, q – плотность электрического заряда, $Q_{\max}$ – максимальный электронный заряд на поверхности резистивного покрытия, $f(x)$ – гауссова функция для пространственного распределения инжектируемого заряда. Система (1) устанавливает зависимость времени прохождения τ и амплитуды $j_{\max}$ токового импульса от удельной электропроводности σ и диэлектрической проницаемости ε резистивного покрытия, что показано на рисунке 1.

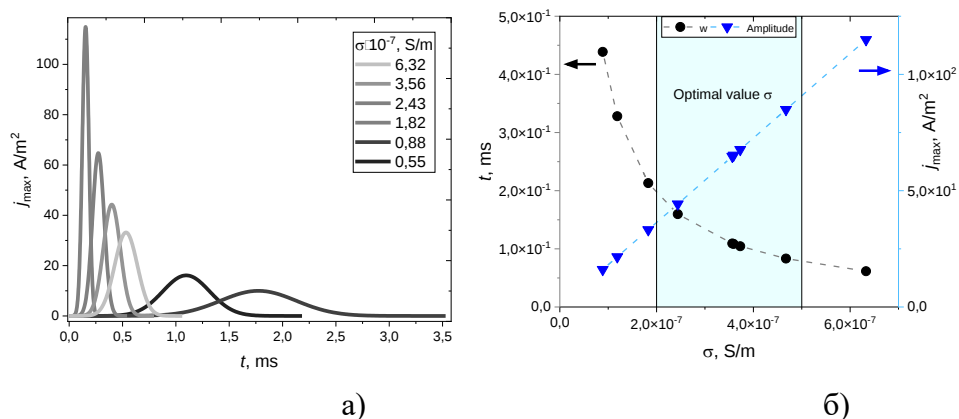


Рисунок 1. а) максимальная плотность тока $j_{\max}$ в покрытии от времени с начала пробоя t для электропроводности $\sigma = (0,55...6,32) \cdot 10^{-7}$ См/м, б) зависимость времени отвода заряда τ и максимальной плотности тока $j_{\max}$ от значений электропроводности материала резистивного покрытия σ

Установлен диапазон удельной электропроводности резистивного покрытия $\sigma = (2...5) \cdot 10^{-7}$ См/м. Такие покрытия, с одной стороны, позволяют отводить заряд за время меньше периода следования электронных лавин, с другой стороны, обеспечивают плотность тока ниже критической, что позволит избежать быстрой деградации покрытия. Результаты будут полезны при улучшении временного разрешения существующих модификаций газовых электронных умножителей. Исследование выполнено в рамках контракта №08626319/21474485-74 с ОИЯИ (г. Дубна, РФ).

ЭРОЗИЯ DLC-ПОКРЫТИЙ ГЕМ-ДЕТЕКТОРОВ ПРИ ВОЗДЕЙСТВИИ ПОВЕРХНОСТНОГО РАЗРЯДА АТМОСФЕРНОГО ДАВЛЕНИЯ

^aЗур И.А., ^aШманай Е.Е., ^bРемнёв Г.Е., ^aФедотова Ю.А.

^aНИУ «Институт ядерных проблем» БГУ, Минск, Беларусь

^bТомский политехнический университет, Томск, Россия

Газовые электронные умножители, применяемые для регистрации ионизирующего излучения, обеспечивают хорошее пространственное разрешение траекторий исследуемых частиц, однако имеют слабую защиту перед газовыми пробоями. Для минимизации негативных последствий пробоев применяют резистивные покрытия электродов, которые, однако, так же подвержены структурной эрозии. В связи с этим, актуальность исследования продиктована необходимостью определения механизмов эрозии резистивных DLC-покрытий при воздействии газового разряда.

Для исследования влияния поверхностного искрового разряда атмосферного давления в газовой среде $Ar_{90}(CO_2)_{10}$ на морфологию и химический состав поверхности DLC-покрытий толщиной 166 нм, осаждённых на полиимидную подложку, создана экспериментальная установка из генератора импульсного электрического напряжения выходной мощностью 0,8 МВт, вольфрамовых электродов и герметичной камеры.

Распространение плазменного канала при поверхностном разряде приводило к эрозии DLC-покрытия: наблюдаются повреждения продолговатой формы, которые являются проекциями плазменных каналов. Изменение химического состава покрытий незначительно.

Для моделирования процесса эрозии DLC-покрытия при температурном воздействии плазмы разряда использовался вычислительный пакет COMSOL. Математическая модель, описывающая эрозию покрытия, состоит из нестационарного уравнения теплопроводности для твёрдого деформируемого тела.

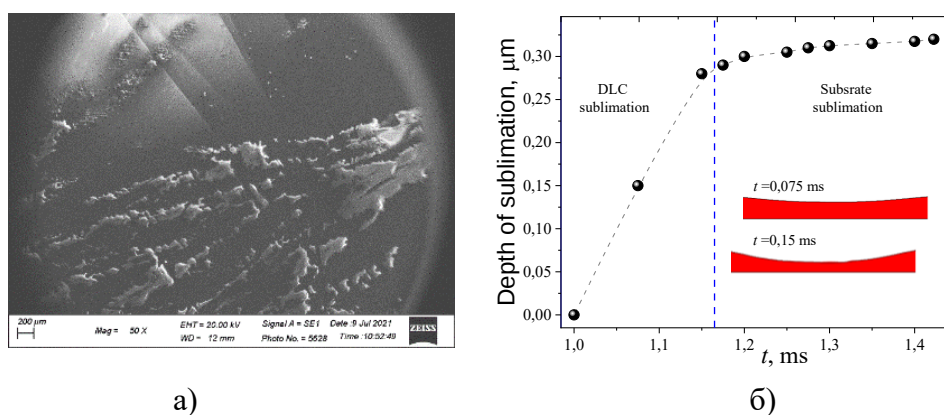


Рисунок 1. а) изображение сканирующей микроскопии участка DLC-покрытия после воздействия разряда, б) магнитуда фронта эрозии DLC-покрытия при воздействии разряда

Исследовано влияние газовых поверхностных разрядов на поверхность DLC-покрытий, установлено, что существенного перераспределения химических элементов в области эрозии покрытия не происходит, а области эрозии являются проекциями стримерных каналов. Разработана математическая модель, позволяющая прогнозировать магнитуду фронта эрозии покрытий при температурном воздействии поверхностного разряда. Авторы выражают благодарность Объединённому Институту Ядерных Исследований (г.Дубна, РФ) за финансирование работ в рамках проекта №08626319/201142470-74.

ГИБКИЕ МАТЕРИАЛЫ НА ОСНОВЕ ФТОРИРОВАННОГО ГРАФЕНА ДЛЯ МЕМРИСТОРОВ

^aИванов А.И., ^{a,b}Антонова И.В.

^a *Институт физики полупроводников им. А.В.Ржанова СО РАН, Новосибирск, Россия*

^b *Новосибирский государственный университет, Новосибирск, Россия*

В настоящее время резистивная память рассматривается в качестве перспективной альтернативы существующим видам энергонезависимой памяти, и прежде всего, флэш-памяти. Ожидается, что устройства на основе мемристоров позволят создавать оперативную память с большей скоростью перезаписи информации, за счёт плотности расположения элементов увеличить емкость хранения данных, а технологии изготовления будут менее затратные. Преимуществом резистивной памяти на основе пленок фторсодержащего графена являются стабильность материала и способность создавать пленки на твердых и гибких подложках при комнатной температуре.

В настоящей работе представлены свойства композитных пленок, состоящих из фторированного графена с наночастицами кристаллогидрата VO_x (преимущественно, V_2O_5) [1]. Были исследованы функциональные параметры тестовых структур, изменяя их толщину и площадь. В таких композитных пленках, встроенных в печатные кроссбар структуры, наблюдается стабильный эффект резистивного переключения с отношением токов в состояниях ON/OFF $10^5 - 10^9$, время переключения достигают 30 нс и до $1,3 \times 10^6$ циклов переключения без каких-либо изменений соотношения токов ON/OFF [2]. Важными параметрами пленок являются состав композиционного материала и толщина пленки. В дополнение к большому и стабильному эффекту резистивного переключения, достоинством созданных плёнок и композита является возможность изготовления приборных структур с использованием 2D печати.

Наночастицы оксида ванадия, упакованные фторированным графеном, из которых состоит разработанный композит, имеют размеры до 20 нанометров при толщине 7-10 нанометров. Электрические измерения с использованием иглы зонда атомно-силового микроскопа показали эффект резистивного переключения с разницей между токам в состояниях ON/OFF достигающий величины до 5-ти порядков. Показана принципиальная возможность использовать отдельные частицы в качестве элементов памяти.

Созданные структуры представляют интерес для изготовления элементов энергонезависимой памяти в области гибкой и печатной электроники.

Работа поддержана грантом РФФ 22-19-00191.

Библиографические ссылки

1. Ivanov A.I. et al. / Nanotechnology. 2019. Vol. 30. P. 255701.
2. Ivanov A.I. et al. / Advanced Electronic Materials. 2019. Vol. 5. P. 1900310.

МАГНИТНЫЕ НАНОЧАСТИЦЫ CoZn ФЕРРИТА ДЛЯ ПОГЛОЩЕНИЯ СВЧ-ИЗЛУЧЕНИЯ

^aИвашенко Д.В., ^aПолын И.Ю., ^bГорохов Г.В., ^bБыченко Д.С., ^aПаньков В.В.

^a *Белорусский государственный университет, Минск, Беларусь*

^b *НИИУ «Институт ядерных проблем» БГУ, Минск, Беларусь*

В настоящее время в приложениях для СВЧ устройств широко применяются магнитные материалы, используемые в качестве поглотителей электромагнитного излучения. Поглотители могут быть использованы, например, для борьбы с электромагнитными помехами, обеспечения электромагнитной совместимости и пр. [1]. В качестве таких материалов могут использоваться ферриты или иные материалы с ферромагнитными свойствами, а также композиты на их основе [2].

В настоящей работе был предложен метод полиол-синтеза для получения наночастиц феррита состава $\text{Co}_{0.65}\text{Zn}_{0.35}\text{Fe}_2\text{O}_4$ для создания перспективных поглотителей СВЧ-излучения. Суспензию 2,7 г хлорида железа (III) гексагидрата $\text{FeCl}_3 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$; 4,1 г ацетата натрия CH_3COONa и 5,7 г дистиллированной воды H_2O в 100 мл этиленгликоля $\text{C}_2\text{H}_4(\text{OH})_2$ поместили в трехгорлую колбу с обратным холодильником. Затем смесь была нагрета до кипения (140 °С) при интенсивном перемешивании. Спустя 8 часов кипения раствор приобрел коричнево-черный оттенок, на стенках колбы наблюдался осадок. Осадок отделялся от раствора методом магнитной декантации. После промывания водой осадок был помещен в сушильный шкаф при 140 °С на 1 час.

Размер и морфологию частиц, полученных методом полиол-синтеза, изучали с помощью сканирующей электронной микроскопии. Наночастицы сферической формы характеризуются одномодальным распределением по размеру со средним значением диаметра частиц порядка 85 нм.

Измерения параметров отраженного и прошедшего сигнала через материал проводились в диапазоне частот 1–18 ГГц коаксиальным методом при помощи векторного анализатора цепей Микран Р4М. Образцы для измерений изготавливались путём диспергирования частиц феррита в массе расплавленного парафина в соотношении 1:1 по массе и имели толщину 3–5 мм.

Из измеренных значений параметров электромагнитного отклика были вычислены значения диэлектрической и магнитной проницаемости полученного материала. Диэлектрическая проницаемость полученного образца составляет около $2.8 + 0.25i$. Магнитная проницаемость принимает значение от 1.4 до 1.0, что говорит о наличии определённых магнитных свойств данного феррита в микроволновой области частот.

Наибольший интерес представляет выраженный резонансный пик поглощения, наблюдаемый на частоте ~16 ГГц. Под воздействием внешнего магнитного поля, перпендикулярного направлению распространения волны в волноводе, возникает различие между электромагнитным откликом образца в прямом и обратном направлении, что говорит об индуцированной анизотропии свойств рассматриваемого материала. Данная закономерность может быть использована для управления электромагнитным полем в СВЧ-устройствах.

Библиографические ссылки

1. Zeng X. et. al. / Carbon. 2020. Vol. 168. P. 606–623.
2. Bregar V.B. / IEEE Transactions on Magnetics. 2004. Vol. 40. P. 1679–1684.

СТАТИЧЕСКИЕ И ДИНАМИЧЕСКИЕ МАГНИТНЫЕ СВОЙСТВА ПОЛИКРИСТАЛЛИЧЕСКИХ ГЕКСАФЕРРИТОВ СИСТЕМЫ $\text{Ba}_2\text{Ni}_{2-x}\text{Cu}_x\text{Fe}_{12}\text{O}_{22}$

^{a, b}Карева К.В., ^aВагнер Д.В., ^aЖуравлев В.А.

^a *Национальный исследовательский Томский государственный университет, Томск, Россия*

^b *Национальный исследовательский Томский государственный университет, научная лаборатория терагерцовых исследований, Томск, Россия*

Оксидные ферритмагнетики с гексагональной структурой, обладающие магнитным порядком типа плоскости лёгкого намагничивания многообещающие материалы для различного применения, ввиду их высоких частот естественного ферромагнитного резонанса в сравнении с ферритами, имеющими кубическую кристаллическую структуру. Внутренняя структура и набор свойств (высокие значения намагниченности насыщения, низкая электрическая проводимость, магнитная проницаемость) позволяют их использовать не только в инженерной области, но и в медицине, электротехнике [1].

В данной работе обсуждаются гексаферриты Y-типа системы $\text{Ba}_2\text{Ni}_{2-x}\text{Cu}_x\text{Fe}_{12}\text{O}_{22}$ ($0 \leq x \leq 1.4$). Поликристаллические порошки гексаферритов были изготовлены методом стандартной керамической технологии. В ходе исследования были изучены электромагнитные характеристики полученных порошков.

По картинам рентгенограмм было выявлено присутствие примесных S- и M-фазы ферритов, что подтверждается так же анализом температурных зависимостей намагниченности и начальной магнитной восприимчивости. На термограммах наблюдаются максимумы, типичные для гексаферритов с плоскостью лёгкого намагничивания вблизи температуры Кюри в диапазоне $300 \div 375$ K [1], однако, при высоких температурах наблюдаются дополнительные особенности в виде ступенек, что является следствием присутствия примесных шпинельной и M-фазы ферритов. Увеличение концентрации ионов Cu^{2+} ведёт к уменьшению температур всех фазовых переходов.

Петли гистерезиса измерялись для гексаферритов с максимальным содержанием Y-фазы ($x=0.4, 1.0, 1.2$). Данные экспериментов показывают, что значения характеристик намагниченности насыщения, остаточной намагниченности, коэффициента прямоугольности и коэрцитивной силы не изменяются сильно с увеличением концентрации ионов Cu^{2+} до состава $x=1.6$. Дальнейшее изменение характеристик связано с увеличенным содержанием магнитотвёрдой M-фазы.

Для изготовления образцов ($x=1$) была выбрана фракция порошка, содержащая частицы размером менее 60 мкм. Соотношение между наполнителем (ферритом) и связующим (эпоксидным клеем ЭДП-2) составляло 75:25 мас.%. Толщина образцов составляла 3.41 ± 0.02 мм. Было изготовлено два набора образцов: первый набор (N1) во время полимеризации не подвергался воздействию внешнего поля, второй (N2) – помещался во внешнее магнитное поле величиной 4 кЭ, приложенное параллельно поверхности образца. Степень текстуры образцов N2 составила 0.86

Спектры коэффициента отражения композитных образцов N1 и N2 показывают, что эффективные полосы поглощения (< -10 дБ) составляли 6.1-12.2 ГГц и 4.4-12.6 ГГц, соответственно. Увеличение рабочей полосы частот в N2 связано с возрастанием величины мнимой части комплексной магнитной проницаемости в диапазоне измерения в сравнении с образцом N1.

Библиографические ссылки

1. Smit, J. et al – Philips Technical Library: Eindhoven, 1959. – 504 p.

ИНТЕРКАЛЯТЫ $\text{Eu}^{\text{II/III}}$ В ДОМЕНАХ ТУРБОСТРАТНОГО УГЛЕРОДА

^aКозлов В.С., ^aБыков А.А., ^bЕремин А.В., ^bПопова Е.А., ^bМасгутов И.И.,
^aБайрамуков В.Ю.

^aПетербургский институт ядерной физики им. Б.П. Константинова Национального исследовательского центра «Курчатовский институт», Гатчина, Россия

^bИнститут высокомолекулярных соединений РАН, Санкт-Петербург, Россия

Показано, что высокотемпературный вакуумный пиролиз дифталоцианина европия ведет к образованию фазы турбостратного углерода ($t\text{-C}$), в который интеркалирован европий в разновалентном ($\text{Eu}^{\text{II/III}}$) зарядовом состоянии. Фаза $t\text{-C}$ характеризуется графеновыми доменами с увеличенным, относительно графита, межплоскостным расстоянием ($d_{002} \geq 0.355$ нм), между которыми интеркалированы атомы металла. Данные мессбауэровской спектроскопии позволили определить зарядовое состояние европия и его динамические свойства в исходном дифталоцианине и его пиролизате, для которых определены температуры Дебая. Показано, что изомерный сдвиг, ширина линии поглощения и величина резонансного поглощения являются чувствительными характеристиками структурных трансформаций фаз образующихся при пиролизе.

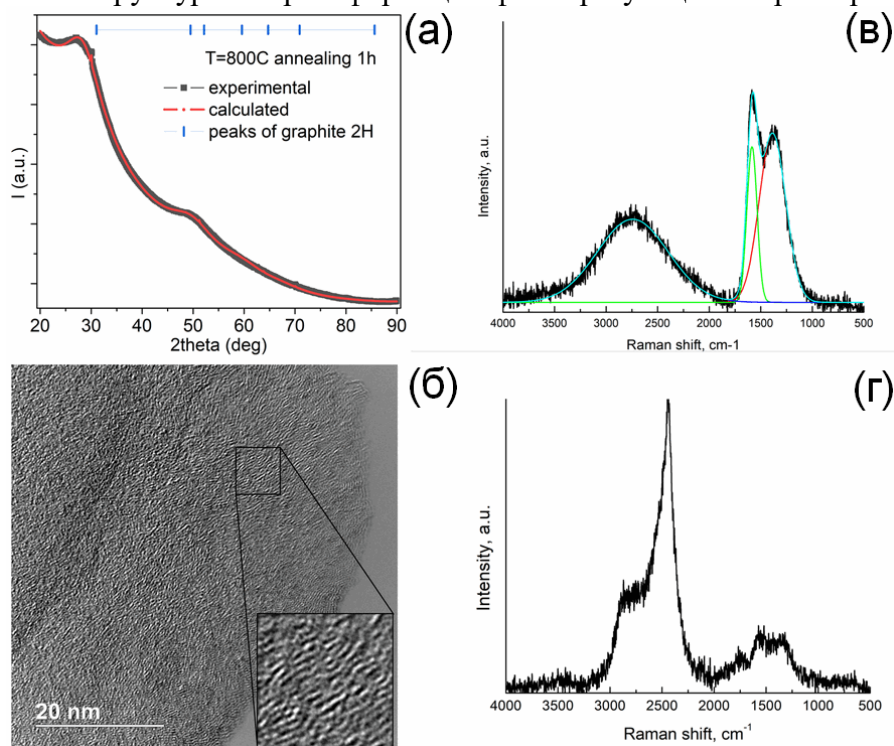


Рисунок 1. Характеристика фазы $t\text{-C}$ согласно данным рентгеноструктурного анализа (a); просвечивающей электронной микроскопии (б) и рамановской спектроскопии, записанной с подавлением фотолюминесценции (v). На рисунке 1 (г) приведен рамановский спектр без подавления фотолюминесценции (2439 cm^{-1}) ионов европия

Исследованы фазовые переходы европий-содержащего $t\text{-C}$ в зависимости от температуры и времени пиролиза: с их увеличением симбатно возрастает доля металл-интеркалированного графита в продуктах реакции.

Предварительные эксперименты показали возможность аналогичного синтеза металл-интеркалированных фаз на основе $t\text{-C}$ и других РЗЭ (Y, Ho, Er, Lu, Sm), что открывает широкие возможности по получению материалов для биомедицинского назначения.

ВЛИЯНИЕ ПРОПУСКАНИЯ ЭЛЕКТРИЧЕСКОГО ТОКА НА ФОНОННЫЕ И ЭЛЕКТРОННЫЕ СВОЙСТВА ГРАФЕНА НА SiO_2/Si И Al_2O_3

^aКолесов Е.А., ^aТиванов М.С., ^aКоролик О.В., ^aСвито И.А., ^aАнтонович А.С.,
^{b,c}Капитанова О.О., ^dПанин Г.Н.

^aБелорусский государственный университет, Минск, Беларусь

^{b,c}Центр фотоники и двумерных материалов, Московский физико-технический институт,
Долгопрудный, Россия

^{cd}Химический факультет, Московский государственный университет им. М. В.
Ломоносова, Москва, Россия

^dИнститут проблем технологии микроэлектроники и особочистых материалов РАН,
Черноголовка, Россия

Актуальность изучения графена обусловлена его уникальными физическими свойствами, делающие его перспективным для ряда различных приложений [1, 2]. Экспериментальный графен синтезирован химическим осаждением из газовой фазы на подложки Cu при температуре 1020 °C, с использованием ПММА перенесён на подложки SiO_2/Si и Al_2O_3 с предварительно изготовленными с помощью фотолитографии контактными площадками на основе Au (60 нм) с подслоем Cr (5 нм). Для анализа фоновых и электронных свойств графена производились измерения спектров комбинационного рассеяния света (КРС) с одновременным измерением вольтамперных характеристик (ВАХ) в диапазоне от 20 В до -20 В в два цикла в вакууме ($<5 \times 10^5$ мбар).

В первом цикле ВАХ для всех образцов наблюдалось выраженное скачкообразное повышение электрического сопротивления до максимальных значений 941,7 и 730,5 Ом при напряжениях в 14 и 18 В для графена на SiO_2/Si и Al_2O_3 , соответственно (второе повышение в случае SiO_2/Si было до 336,6 Ом при -16 В), с последующим снижением до первоначальных значений. Это указывает на наличие конкуренции между снижением расстояния графен-подложка (конформация) и десорбцией легирующих адсорбатов из-за джоулева нагрева. Сопротивление графена на SiO_2/Si после первого цикла уменьшилось с 473,4 до 288,6 Ом (преобладание десорбции) и увеличилось до 360,3 Ом в конце второго цикла (преобладание конформации). Для Al_2O_3 , сопротивление увеличивалось с 175,9 Ом (в начале 1 цикла) до 283,3 Ом (конец 1 цикла) и до 320,0 Ом (конец 2 цикла), что свидетельствует о более выраженной конформации в этом случае. Форма кривых ВАХ для 2 цикла во всех случаях качественно соответствовала литературным данным [3, 4].

В результате одновременных измерений КРС получены зависимости положений линий ω_G , ω_{2D} , и соотношения интенсивностей I_{2D}/I_G от напряжения. Первый локальный минимум на всех зависимостях ω_G , ω_{2D} достигался раньше по напряжению в случае подложки Al_2O_3 , при сдвигах больше на $\sim 4\text{--}13 \text{ см}^{-1}$. Вторые локальные минимумы примерно соответствовали друг другу по напряжению и демонстрировали разницу сдвигов $\sim 2 \text{ см}^{-1}$. Зависимость I_{2D}/I_G , нелинейно связанная с концентрацией носителей заряда в графене [5], показывала выраженный спад при первом увеличении напряжения, что соответствует снижению расстояния графен-подложка. Параллельные измерения КРС показали постепенное увеличение концентрации дырок в процессе обработки с общим средним значением $\Delta p \sim 3,0 \times 10^{12} \text{ см}^{-2}$ для графена на SiO_2/Si и $\Delta p \sim 7,9 \times 10^{12} \text{ см}^{-2}$ – для случая Al_2O_3 .

Библиографические ссылки

1. Novoselov K.S. et. al. / Science. 2004. Vol. 306. P. 666–669.
2. Randviir E.P. et. al. / Mater. Today. 2014. Vol. 17. P. 426–432.
3. Hertel S. et. al. / Appl. Phys. Lett. 2011. Vol. 98. P. 212109.
4. Sojoudi H. et. al. / J. Vac. Sci. Technol. B. 2012. Vol. 30. P. 041213.
5. Beams R. et. al. / J. Phys. Cond. Matt. 2015. Vol. 27. P. 083002.

ЭЛЕКТРОПРОВОДНОСТЬ НА ПОСТОЯННОМ И ПЕРЕМЕННОМ ТОКЕ ГИБРИДНЫХ ПЛЕНОК ИЗ УГЛЕРОДНЫХ И WS₂-НАНОТРУБОК

^aКсеневиц В.К., ^aГромов И.Н., ^aГорбачук Н.И., ^bШуба М.В.

^aБелорусский государственный университет, Минск, Беларусь

^bНИИУ «Институт ядерных проблем» БГУ, Минск, Беларусь

Гибридные композитные структуры, состоящие из углеродных и неорганических наноматериалов, представляют интерес для их практического использования при разработке элементов фотовольтаики, химических и газовых датчиков, суперконденсаторов и т.д. [1].

Нами ранее разработан метод получения гибридных пленок из однослойных углеродных нанотрубок (ОУНТ) и неорганических нанотрубок дисульфида вольфрама [2, 3]. В данной работе проведено исследование электропроводности гибридных пленок, состоящих из смешанных в разных пропорциях ОУНТ и неорганических полуизолирующих нанотрубок WS₂. Проведены измерения вольтамперных характеристик (ВАХ) пленок из ОУНТ и гибридных пленок с различным массовым содержанием в них углеродной и неорганической компонент (1:10, 1:5, 1:2) в диапазоне температур 2-300 К, а также измерения зависимостей адмиттанса пленок от напряжения постоянного смещения в диапазоне частот 100 Гц-1 МГц, выполненные при температурах 4.2, 77 и 300 К.

Было обнаружено, что ВАХ пленок из ОУНТ и гибридных пленок с различным содержанием в них проводящих углеродных нанотрубок при одних и тех же температурах отличаются несущественно. При этом коэффициенты нелинейности ВАХ варьируются от величины, близкой к 2 при $T = 4$ К до величины, близкой к 1 при $T = 300$ К. Установлено, что в области низких температур и высоких частот вид нелинейных зависимостей адмиттанса гибридных пленок из проводящих ОУНТ и полуизолирующих неорганических нанотрубок WS₂ от приложенного к ним напряжения постоянного смещения $G(U)$ существенно отличается от имеющих монотонный характер зависимостей $G(U)$ для пленок, полученных только из углеродных нанотрубок. Так, для гибридных пленок с промежуточным значением электропроводности при 100 кГц наблюдался минимум на измеренных при $T = 4,2$ К зависимостях $G(U)$ в области 2 В. В области этого экстремума вклады реактивной (емкостной) и активной (резистивной) частей импеданса примерно равны друг другу, а угол сдвига фаз $\varphi \sim 45^\circ$. Для гибридных пленок с наибольшим содержанием углеродных нанотрубок на зависимостях $G(U)$ также наблюдался минимум в области 1,5 В при измерениях на частоте 1 МГц при $T = 4,2$ К. Увеличение действительной части адмиттанса при увеличении величины напряжения постоянного смещения вызвано уменьшением высоты контактных барьеров между ОУНТ, что согласуется с моделью флуктуационно-индуцированного туннелирования носителей заряда. Наблюдаемое на высоких частотах уменьшение действительной части адмиттанса при увеличении величины напряжения постоянного смещения может быть связано с изменением емкости контактов между ОУНТ.

В пленках из ОУНТ, а также гибридных пленках с максимальным содержанием ОУНТ при температуре $T = 4.2$ К при приложении напряжения постоянного смещения $U > 3$ В обнаружен положительный угол сдвига фаз между током и напряжением, связанный с квазибаллистическим механизмом переноса заряда в углеродных нанотрубках.

Библиографические ссылки

1. Eder D. / Chem. Rev. 2010. Vol. 110. P. 1348-1385.
2. Ksenevich V.K. et al. / Nanosystems: Phys., Chem., Math. 2016. Vol. 7. P. 37–43.
3. Ksenevich V.K. et al. / Nonlinear Phen. Compl. Syst. 2017. Vol. 20. P. 360–367.

АМОРФНЫЙ УГЛЕРОД В НАНОСТРУКТУРИРОВАННЫХ УГЛЕРОДНЫХ МАТЕРИАЛАХ (СОВМЕСТНОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ПЭМ, РФЭС, СКР И РФА)

^aКузнецов В.Л., ^aМосеенков С.И., ^aЗолотарев Н.А., ^{a,b}Колесов Б.А., ^aПросвирин И.П.,
^aИщенко А.В., ^aЗаворин А.В.

^aИнститут катализа им. Г.К.Борескова, Новосибирск, Россия

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

Углеродные наноматериалы (нанотрубки, графены и их производные, наноалмазы и др.) становятся более востребованными в производстве и технике, за счёт своих уникальных физико-химических свойств, а именно хорошей электрической проводимости, высокой прочности и теплопроводности. Вместе с тем, углеродные материалы могут содержать на своей поверхности примеси аморфного углерода (АУ), который может находиться в различных модификациях в зависимости от условий их получения, и оказывать влияние на взаимодействие углеродных материалов с матрицей композита. В силу этого, при введении углеродных материалов в состав композитов, свойства получаемых материалов могут зависеть от содержания примесей АУ.

Мы провели охарактеризование аморфизованных форм углерода в широком наборе наноструктурированных углеродных материалов (сажа, многослойные углеродные нанотрубки, каталитический волокнистый углерод, углерод луковичной структуры, взрывные наноалмазы). АУ состоит из атомов углерода в трёх основных электронных состояниях, соответствующих sp , sp^2 и sp^3 гибридизации электронных оболочек. Поскольку sp^2 формы углерода в обычных условиях термодинамически являются наиболее устойчивыми, то они являются основными строительными блоками АУ. В силу этого основные усилия были направлены на охарактеризование sp^2 фрагментов аморфного углерода с использованием трёх независимых физических методов (ПЭМ, СКР и РФА), позволяющих получить взаимодополняющую информацию.

Использование высокотемпературных обработок, приводящих к укрупнению первичных графеновых блоков, позволило проследить за процессом их графитизации. Размеры графеновых фрагментов сажи, прогретой при разных температурах, были оценены при помощи ПЭМ и СКР. При нагреве всех УМ при использовании ПЭМ наблюдалось увеличение протяженности графеновых фрагментов, числа слоев в образующихся графитоподобных блоках, при этом в спектрах КР наблюдалось уменьшение D_i мод и увеличение G и $2D$ колебательных мод, что свидетельствует о графитизации УМ. Для количественной обработки КР спектров была выбрана модель, предложенная в работе [1], более подходящая для оценки размеров протяжённых графеновых фрагментов сажи.

По причине неоднородности аморфного углерода при обработке КР спектров в районе моды D_3 (колебания аморфного углерода) было выделено два пика ($\sim 1454 \text{ см}^{-1}$ и 1523 см^{-1}), что, по-видимому, соответствует различным формам АУ. Из результатов обработки КР спектров (анализ D мод колебаний, их соотношение) было показано, что природа и количество углерода в аморфном состоянии существенно различается для разных типов УМ.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ 22-23-00932.

Библиографические ссылки

1. Tuinstra F., Koenig J.L. / J. Chem Phys. 1970. Vol. 53. P. 1126–1130.

ТЕРАНОСТИЧЕСКИЙ ПОТЕНЦИАЛ УГЛЕРОДНЫХ НАНОМАТЕРИАЛОВ

Кулагова Т.А., Голубева Е.Н.

НИИУ «Институт ядерных проблем» БГУ, Минск, Беларусь

Углеродные наноразмерные материалы (УН), обладая уникальными оптическими, механическими, электрическими, термическими свойствами, высоким соотношением площади поверхности к объему, являются перспективными тераностическими агентами и платформами для создания мультифункциональных комплексов.

В процессе синтеза можно варьировать как рельеф УН, создавая нано- и микроструктурированные поверхности, так и наличие функциональных групп, делая их биосовместимыми, гидрофобными/гидрофильными, что позволяет существенно расширить области применения УН в биомедицине.

Установлены механизмы взаимодействия углеродных нанотрубок (УНТ) с клетками глиомы при кратковременном и длительном сокультивировании. УНТ накапливаются в клетках по механизму эндоцитоза, при этом происходит снижение трансмембранного и повышение митохондриального потенциалов. Через 24 ч взаимодействия клеток с нанообъектами происходит внутриклеточная агрегация УНТ в структуры микронного размера, параметры плазматической и митохондриальной мембран восстанавливаются. Разработаны методические подходы для оценки локальной концентрации ОУНТ в клетках методом спектроскопии комбинационного рассеяния света. Продемонстрировано фото-термо-акустическое разрушение клеток глиомы крысы С6, накопивших УНТ в цитоплазме, при действии импульсного лазерного излучения.

Графеновые квантовые точки (ГКТ) являются флуоресцирующим материалом, подходящим для различных биомедицинских приложений. Показано, что ГКТ накапливаются на поверхности и внутри эритроцитов, тромбоцитов, нейтрофилов, при этом клетки сохраняют свою целостность. Однако меняется форма эритроцитов, регистрируется формирование эхиноцитов. ГКТ локализуются на мембранах клеток, а при длительном инкубировании – распределяются во внутриклеточном пространстве. Зарегистрировано изменение микровязкости мембран эритроцитов при взаимодействии с ГКТ. Установлено, что ГКТ индуцируют агрегацию тромбоцитов в отсутствие дополнительных агонистов только в безбелковых средах. При этом формируется большое количество сфероидных агрегатов, на поверхности которых расположены прокоагулянтные тромбоциты. Инкубирование нейтрофилов и мононуклеаров с ГКТ приводило к активации клеток. Интенсивность флуоресценции ГКТ в нейтрофилах через 30 мин клеточной адгезии была в 3 раза выше, чем через 90 мин, что свидетельствует о разрушении и/или нарушении структуры ГКТ после проникновения в нейтрофилы и взаимодействия с активными формами кислорода и хлора. Выявлено, что ГКТ могут быть использованы в качестве сенсоров хлорноватистой кислоты в водных растворах и клеточных системах. HOCl/OCl^- модифицируют кислород-содержащие группы ГКТ, что приводит к снижению флуоресценции ГКТ.

Продемонстрирована биосовместимость алмазных микроиглол, разработан метод полностью оптической термометрии на основе использования зависимости параметров фотолуминесценции SiV-центров окраски этих материалов от температуры.

Таким образом, применение методов флуоресцентной микроскопии и спектроскопии комбинационного рассеяния света с использованием импульсного лазерного излучения позволяет как визуализировать накопление УН (в комплексах с перспективными терапевтическими агентами) в клетках, так и индуцировать клеточную гибель. УН являются перспективным тераностическим агентом.

МОДЕЛИРОВАНИЕ ЭЛЕКТРОМАГНИТНОГО ОТКЛИКА ОТ КОМПОЗИЦИОННЫХ СТРУКТУР НА ОСНОВЕ ПЛАСТИКОВ ДЛЯ 3D ПЕЧАТИ С ВКЛЮЧЕНИЯМИ УГЛЕРОДНЫХ НАНОТРУБОК

Кулешов Г.Е., Трофимов Е.А., Бадьин А.В.

Национальный исследовательский Томский государственный университет, Томск, Россия

Развитие и миниатюризация современной электроники способствует переходу на все более высокие рабочие частоты, что способствует всестороннему развитию СВЧ и КВЧ техники. В следствии этого возникает острая потребность в материалах, эффективно действующих на данных частотах. В качестве радиоматериалов высокочастотного диапазона наиболее хорошо себя зарекомендовали себя ферриты структуры шпинели; в СВЧ диапазоне – гексаферриты, карбонильное железо или углеродные материалы [1, 2]; в КВЧ диапазоне в основном используются лишь различные типы углеродосодержащих материалов [2]. Широкое использование углерода обусловлено его уникальной структурой, благодаря чему существуют целые классы углеродных материалов (одностенные и многостенные углеродные нанотрубки, графены, фуллерены, луковичные структуры, наноалмазы и др.), обладающие самыми разнообразными свойствами [3]. Помимо этого, использование углеродосодержащих филаментов в аддитивной технологии 3D печати позволяет создавать сложные композиционные структуры, эффективно взаимодействующие с электромагнитным излучением КВЧ диапазона. Целью данного исследования является моделирование электромагнитного отклика от композиционных структур на основе пластиков для 3D печати с углеродными нанотрубками и определение возможности использования исследуемых структур в качестве поглотителей электромагнитного излучения КВЧ диапазона.

Моделирование проводилось в плосковолновом приближении в специально написанной программе, а также в специализированном программного пакете для электромагнитного анализа CST Studio Suite. В качестве материала для моделирования выступали композиты на основе АБС-пластика с содержанием МУНТ (средний диаметр нанотрубок 9,4 нм) от 1 до 5 масс.%, которые ранее были экспериментально исследованы. плоского материала Расчет проводился как в свободном пространстве по схеме «на проход», так и на металле. В качестве моделей использовались однослойные и двухслойные материалы, как с плоской поверхностью, так и сложной структуры.

Для покрытия металлизированных поверхностей перспективно использовать композиты на основе АБС пластика и 4 масс.% МУНТ (при толщине $d=0,75$ мм $R<20\%$ на частотах 115–258 ГГц) или 3 масс.% МУНТ-3 (при толщине $d=0,2$ мм $R<10\%$ на частотах 130-200 ГГц). К основному слою на металле выгоднее добавлять пористый согласующий слой, чем ребристый. Добавление слоя (толщиной 1 мм) с воздушными полусферами ($r=1$ мм) на слой композита основе АБС пластика и 4 масс.% МУНТ-2 уменьшает максимальную величину коэффициента отражения с 20% до 4,6% во всем диапазоне частот.

Для использования в качестве поглотителя в свободном пространстве перспективно использовать композит на основе АБС пластика и 1 масс.% МУНТ-2 (при толщине $d=4$ мм $R<10\%$, $T<9\%$ на частотах 115-258 ГГц). В свободном пространстве выгоднее использовать рифление чем сферические поры на поверхности. Нанесение ребристости из АБС пластика или из композита с 1 масс.% МУНТ уменьшает максимальную величину коэффициента отражения с 10% до 0,9% или до 0,35% соответственно во всем диапазоне частот.

Библиографические ссылки

1. Acharya S. et. al. / J. of App. Phys. 2020. Vol. 128. No 104902.
2. Kazakova M.A. et. al. / Composites Science and Technology. 2021. Vol. 13 (8). No 1191.
3. Kuleshov G., Badin A. / IOP Mat. Sci. and Eng. 2019. Vol. 525(1). No 012030.

МОДЕЛИРОВАНИЕ ЭФФЕКТОВ НЕЙТРОНЗАХВАТНОЙ ТЕРАПИИ С ПРЕПАРАТАМИ БОРА И ГАДОЛИНИЯ

^aКулик В.К., ^aКулагова Т.А., ^aГолубева Е.Н., ^aДемиденко М.И., ^bБугай А.Н.

^aНИУ «Институт ядерных проблем» БГУ, Минск, Беларусь

^bЛаборатории радиационной биологии, Объединенный институт ядерных исследований, Дубна, Россия

Одним из направлений в решении проблемы избирательного поражения опухолевых клеток при лучевой терапии является развитие метода нейтрон-захватной терапии (НЗТ). НЗТ является технологией, использующей препараты, содержащие нуклиды (^{10}B или ^{157}Gd), которые, поглощая нейтроны, образуют вторичное излучение и высокоэнергетичные частицы, направленные на уничтожение опухолевых клеток. Пациента после введения препарата с нерадиоактивными изотопами ^{10}B или ^{157}Gd , облучают пучком нейтронов с плотностью потока 10^9 нейтрон/см²×с и энергиями в интервале от 0,5 эВ до 10 кэВ. Теряя части энергии при проникновении в ткань, нейтроны захватываются ^{10}B или ^{157}Gd . Образующийся $^{11}\text{B}^*$, распадается на высокоэнергетичные альфа-частицы, ядра ^7Li и гамма-квант (94% случаев) [1] или, в случае с ^{157}Gd , образуется высокоэнергетическое гамма-излучение и Оже-электроны. Эффективность НЗТ зависит, главным образом, от концентрации ^{10}B или ^{157}Gd и их избирательного накопления и распределения именно в опухолевых клетках-мишенях. В клинической практике используют боркапнат и борфенилаланин [2], а также фармацевтические препараты гадолиния для МРТ. В качестве эффективных «носителей» изотопа ^{10}B в настоящее время рассматривают бор-нитридные наночастицы. Цель работы — подбор оптимальных параметров НЗТ с использованием препаратов, содержащих бор и гадолиний. Процесс взаимодействия продуктов деления с веществом опухоли моделировался с помощью программного кода MCNP. Голова пациента в программном пакете была представлена в виде сферы радиусом 8 см, опухоль — сферой, расположенной в центре фантома головы, радиусом 2 см.

Ранее нами было показано, что при 4 положениях атомов бора: на поверхности клеточной мембраны, внутри цитоплазмы, внутри ядра, в межклеточном пространстве — большинство образованных ионов He и Li не выходят за пределы клетки (пробег ≤ 10 мкм) в направлении их распространения и теряют свою энергию непосредственно в ней. Т.е. ионы локально разрушают одну опухолевую клетку, ограничивая при этом воздействие на соседние клетки. Доза же от гамма-лучей, образующихся при гадолиний-НЗТ, распределяется не только в опухоли, но и в здоровой ткани, повышая вероятность её повреждения.

При моделировании установлено, что достижение дозы, равной 2 Зв, в опухоли, содержащей ^{10}B в концентрации 100 мкг/г, возможно за 75 минут облучения. Накопление этой же дозы при аналогичной концентрации ^{157}Gd в опухоли возможно за 12 часов. Такой продолжительный период времени вызывает необходимость увеличения концентрации ^{157}Gd в опухоли или плотности потока нейтронов. Но т.к. плотности потока нейтронов в пучках ядерных реакторов, использующихся для клинических исследований НЗТ, не превышают 10^9 нейтрон/см²×с, целесообразнее искать способы повышения концентрации препарата в ткани, учитывая при этом цитотоксичность гадолиния. Таким образом, не смотря на большее в ≈ 66 раз сечение захвата нейтронов гадолинием, основной вклад в поражение опухолевых клеток вносят продукты ядерной реакции, и с этой точки зрения борнитридные наночастицы выглядят более перспективными.

Библиографические ссылки

1. Locher G.L. / Amer. J. Roentgenol. Radium Ther. 1936. Vol. 36. № 1. P. 1–13.
2. Soloway A.H. et.al. / Chem. Rev. 1998. P. 1515–1562.

КОМПОЗИТНЫЕ ПРОТОНОПРОВОДЯЩИЕ МЕМБРАНЫ С НАНОАЛМАЗАМИ ДЛЯ ВОДОРОДНОЙ ЭНЕРГЕТИКИ

^aКульвелис Ю.В., ^aЛебедев В.Т., ^bПримаченко О.Н., ^cШвидченко А.В., ^cЮдина Е.Б.

^a*Петербургский институт ядерной физики им. Б.П. Константинова НИЦ «Курчатовский институт», Гатчина, Россия*

^b*Институт высокомолекулярных соединений РАН, Санкт-Петербург, Россия*

^c*Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе РАН, Санкт-Петербург, Россия*

Ионообменные (протонообменные) перфторированные мембраны выполняют важную функцию при работе в современных энергетических установках широкого диапазона по мощности. Такие мембраны содержат гидрофобную полимерную матрицу и гидрофильную фазу, формирующую разветвленную сеть пор, внутренняя поверхность которых покрыта ионогенными $-\text{SO}_3\text{H}$ -группами, которые обеспечивают транспорт протонов при насыщении мембраны водой. Развитие индустрии водородной энергетики включает исследования мембран на основе сополимеров с различными длинами боковых цепей. Наиболее изученными и традиционно используемыми являются мембраны типа Nafion®, с длинными боковыми цепями. Однако исследования последнего десятилетия показали преимущества короткоцепных мембран типа Aquivion® по проводящим свойствам [1].

Настоящая работа направлена на усовершенствование перфторированных протонопроводящих мембран для улучшения их проводящих свойств и эксплуатационных характеристик. Нами приготовлены и исследованы несколько серий мембран как с короткими, так и с длинными боковыми цепями (аналоги коммерческих мембран Aquivion® и Nafion®), модифицированные частицами детонационного наноалмаза (ДНА, размер частиц 4-5 нм). Композитные мембраны готовились методом полива смесей растворов сополимера и суспензий ДНА в ДМФА. Частицы ДНА, несущие на своей поверхности различные функциональные группы, распределяются по мембране достаточно однородно, либо образуют крупные кластеры, в зависимости от знака заряда поверхности ДНА и их концентрации в мембране. Для модификации мембран были использованы 4 типа наноалмазов: отрицательно заряженные (ζ^- , группы $-\text{COOH}$, $-\text{OH}$ на поверхности), положительно заряженные (ζ^+ , $-\text{H}$), сульфированные ($-\text{SO}_3\text{H}$, $-\text{H}$) и фторированные ($-\text{F}$).

В структуре мембраны, по данным малоуглового рассеяния нейтронов и рентгеновских лучей, элементарные тонкие каналы проводимости сохраняются практически без изменений. Частицы ДНА встраиваются в мембраны на следующем структурном уровне (между пучками каналов), либо формируют отдельную фазу, на границе гидрофильной и гидрофобной областей мембраны [2]. Наибольший эффект роста протонной проводимости получен для системы мембран типа Aquivion® с ДНА ζ^+ , где частицы ДНА концентрируются вблизи гидрофильных протонопроводящих каналов, формируя разветвленную сеть из частиц ДНА, что способствует увеличению мобильности протонов. Установлено оптимальное содержание ДНА в мембране - 0,5 вес. % относительно массы сополимера, при превышении которого частицы ДНА начинают блокировать часть проводящих каналов, что приводит к дальнейшему снижению проводимости [3]. Мембраны обладают хорошей механической прочностью, а повышенная протонная проводимость позволит увеличить эффективность их работы в составе водородных топливных элементов.

Библиографические ссылки

1. Primachenko O.N. et al. / Polym.Adv.Technol. 2020. Vol. 32. P. 1386–1408.
2. Kulvelis Yu.V. et al. / Fullerenes, Nanotubes and Carbon Nanostructures 2020. Vol. 28. P. 140–146.
3. Primachenko O.N. et al. / Membranes 2022. Vol. 12. P. 827.

ЭЛЕКТРОПРОВОДНЫЕ ЛЮМИНЕСЦЕНТНЫЕ ГИБРИДНЫЕ МАТЕРИАЛЫ НА ОСНОВЕ ПОЛИМЕР-ГРАФЕНОВЫХ КОМПОЗИТОВ

^aКухто А.В., ^aПоддубская О.Г., ^aМаксименко С.А., ^aКулагова Т.А., ^bПавич Т.А.

^a НИУ «Институт ядерных проблем» БГУ, Минск, Беларусь

^b Институт физики им. Б.И.Степанова НАН Беларуси, Минск, Беларусь

Предложен люминесцирующий и электропроводящий полимерный композиционный материал на основе полимера полимолочной кислоты (ПМК), наполненный супрамолекулярным комплексом европия, физически или химически прикрепленным к 2D-нанопластинкам (оксид графена или графен). Электропроводность композитной пленки увеличивается на несколько порядков по сравнению с чистым полимером, как и в случае немодифицированного графена. Простая и надежная предложенная процедура легко масштабируется и открывает путь для коммерциализации этого наноматериала. Предлагаемый материал подходит для технологии 3D-печати и широкого применения в оптоэлектронике.

МЕХАНИЧЕСКИЕ И КАТАЛИТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА Ir- И Rh-СОДЕРЖАЩИХ ХИТОЗАНОВЫХ ПЛЁНОК

**Лопашинова Е.П., Годзишевская А.А., Курасова М.Н., Андреева О.И.,
Критченков А.С.**

Российский университет дружбы народов, Москва, Россия

Плётки на основе хитозана, включающие в свой состав катионы металлов, используются в качестве катализаторов различных реакций. Интересным является использование платиновых металлов как компонентов мембранных катализаторов [1, 2].

Полученные иридий и родийсодержащие плётки были исследованы с помощью ИК-спектрометрии, ДТА, СЭМ, РФА и РФС.

Механические свойства плёнок оценивались относительно двух параметров: предел кратковременной прочности (σ_b (МПа)) и относительная деформация плётки до разрыва (ϵ_b (%)). Для образцов оба показателя линейно падают при увеличении концентрации металла в плётке, что может быть связано с уменьшением концентрации полимера(хитозана) в указанных образцах.

Однако, иридийсодержащие образцы характеризуются более высокими механическими свойствами, чем родийсодержащие образцы. Таким образом можно сделать вывод о том, что природа металлоцентра влияет на механические свойства плёнок. Каталитическая активность оценена в препаративном эксперименте каталитический эффект полученных плёнок в модельной альдольной реакции между бензальдегидом и ацетоном, приводящей к образованию альдоля – 4-гидрокси-4-(4-хлорфенил)бутан-2-она.

Иридиевая хитозановая плётка с объёмными соотношениями Ir/хитозан представляет собой эффективный мембранный катализатор альдольной реакции на основе природного полимера хитозана.

Библиографические ссылки

1. Vadivela T. Carbohydrate Research. 2020. – 487 p.
2. Varmaa A.J., Deshpand S.V., Kennedy J.F. / Carbohydrate Polymers. Vol. 55. 2004. P. 77–93.

ВЛИЯНИЕ УСЛОВИЙ ТЕРМООБРАБОТКИ НА ЭЛЕКТРОХИМИЧЕСКИЕ И ФОТОЭЛЕКТРОХИМИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА НАНОТРУБОК TiO_2

Мальтанова А.М., Позняк С.К.

Научно-исследовательский институт физико-химических проблем БГУ, Минск, Беларусь

Наноструктурированный TiO_2 является перспективным материалом для фотокатализаторов, электрокатализаторов и фотохимических датчиков благодаря уникальным структурным, химическим, электронным и оптическим свойствам [1]. Одним из простых способов получения диоксида титана с упорядоченной структурой нанотрубок является электрохимическое анодирование титановых электродов в этиленгликолевых электролитах с добавкой фторида аммония [2]. Последующая термическая обработка полученных аморфных нанотрубок TiO_2° приводит к их кристаллизации, причем фазовый состав зависит от температуры прогрева. Варьирование параметров отжига может также приводить к изменению функциональных свойств TiO_2 . Целью настоящей работы было исследование электрохимических и фотоэлектрохимических свойств нанотрубок TiO_2 , прогретых на воздухе и в атмосфере водорода.

Слои вертикально расположенных нанотрубок со средним внутренним диаметром 60 нм были получены методом двухстадийного анодного окисления Ti электродов. Для получения кристаллической структуры анатаза образцы были прогреты при 500°C в течение 1 ч на воздухе либо в атмосфере H_2 . Исследование электрокаталитической активности полученных нанотрубок в реакции восстановления кислорода (РВК) проводили в 0,1 М растворе КОН, который насыщали O_2 в течение 1 ч. Фотоэлектрохимическое исследование выполняли в потенциостатических условиях с использованием в качестве электролита 0,1 М КОН с добавкой глицина, играющего роль акцептора дырок. В качестве источника света использовалось монохроматическое излучение.

На вольтамперной кривой, характеризующей восстановление O_2 на нанотрубках TiO_2 , прогретых на воздухе, наблюдаются две хорошо выраженные катодные волны при потенциалах отрицательнее -0,7 В. В случае нанотрубок TiO_2 , прогретых в атмосфере водорода, появляется дополнительная волна РВК при $\sim -0,48$ В и заметно увеличивается плотность тока при потенциалах отрицательнее -0,8 В. Снижение перенапряжения восстановления кислорода в случае нанотрубок, прогретых в атмосфере водорода, может быть связано с генерацией центров Ti^{3+} в структуре TiO_2 . Потенциал начала фототока на электродах TiO_2 , прогретых как на воздухе, так и в водороде, практически совпадает и находится в области ~ -1 В. Спектральные зависимости фототока для электродов, прогретых в атмосфере H_2 , характеризуются появлением заметного фототока в области примесного поглощения TiO_2 ($\lambda > 450$ нм).

Работа выполнена при финансовой поддержке ГПНИ РБ «Химические процессы, реагенты и технологии, биорегуляторы и биоорганическая химия», №2.1.04.02.

Библиографические ссылки

1. Khataee A., Mansoori, G.A. World Scientific. – Singapore, 2012. – 204 p.
2. Zwilling V. et. al. / Surf.Interf.Anal. 1999. Vol. 27. P. 629–637.

МАТЕРИАЛ, ОБЕСПЕЧИВАЮЩИЙ ЭЛЕКТРОМАГНИТНУЮ ГЕРМЕТИЧНОСТЬ НА ВЫСОКИХ ЧАСТОТАХ

^aМатыскин К.Е., ^bСусляев В.И., ^bКоровин Е.Ю., ^aДенисенко А.В., ^bДорожкин К.В.,
^bГладков Ю.Н.

^a ООО «МК– Электрон», Томск, Россия

^b Национальный исследовательский Томский государственный университет, Томск,
Россия

Одной из важных задач обеспечения электромагнитной совместимости высокочастотных радиоэлектронных устройств является электромагнитная герметичность. Просачивание электромагнитного сигнала через технологические отверстия, разъемы, через зазоры в крышке корпуса может привести к несанкционированным обратным связям, снижающим качественные показатели приборов. Для достижения электромагнитной совместимости требуются эластичные, проводящие материалы, обладающие поглощающими свойствами. В фирме ООО «МК–Электрон», которая специализируется на решении задач электромагнитной совместимости в широком диапазоне частот, в результате поисковой работы разработан композиционный материал на основе электропроводящего мелкодисперсного порошка меди, покрытого серебром марки ПМИ-12 (ТУ 24.44.21-001-32946049-2018), которым наполняется матрица из резиновой силиконовой смеси ИРП-1401 (ТУ 38.103372-77). Смешивание производится на холодных вальцах с коэффициентом трения 1:1,15. В качестве вспомогательного вещества, облегчающего введение металлического порошка в матрицу, использовано силиконовое масло марки ПМС-100. Количество электропроводящего порошка в смеси варьируется в широких пределах, при этом постоянно контролируется электропроводимость. Далее, электропроводящая силиконовая смесь загружается в резиновый вулканизационный пресс с усилием сжатия 100 кг/см² и вулканизируется. Время вулканизации – 10 минут, температура вулканизации – 190°С. После извлечения лист кондиционируют при комнатной температуре 24 часа. При концентрации порошка 85 массовых процента композит становится проводящим, а его плотность равна 4,06 г/см³.

Оценивалась возможность применения разработанного материала в качестве экранирующего устройства в терагерцовом диапазоне частот. Измерение электромагнитного отклика (коэффициентов отражения, прохождения и поглощения) производилось методом свободного пространства в ЦКП «Центр радиоизмерений ТГУ» [1] на спектрометре терагерцового диапазона СТД-21 [2]. Для измерения использовался плоскопараллельный образец толщиной 1 мм. Образец располагался таким образом, чтобы направление зондирующего сигнала было перпендикулярно поверхности образца. Результаты показали, что 1 мм слой разработанного композита снижает уровень прошедшего сигнала на частоте 120 ГГц более, чем в 10, а на частоте 260 ГГц почти в 1000 раз.

Материал обладает гибкостью и пластичностью, которая регулируется температурой. Это качество может быть использовано для создания филамента для 3D печати, что позволяет применить аддитивную технологию для изготовления сложных конструкций экранов из разработанного материала.

Библиографические ссылки

1. Томский региональный центр коллективного пользования (ТРЦКП). Электронный ресурс. URL: / <http://ckp.tsu.ru/about/>, Дата обращения 20.09.2022 г.
2. Сусляев В.И. [и др.] / Известия вузов. Физика. 2011 Т. 54. № 9/2. С. 138 – 146.

РАССЕЯНИЕ МИКРОВОЛЬНОГО И ТЕРАГЕРЦОВОГО ИЗЛУЧЕНИЯ НА ДВУХСЛОЙНОЙ УГЛЕРОДНОЙ НАНОТРУБКЕ С УЧЕТОМ МЕЖСЛОЙНОГО ПЕРЕНОСА ЗАРЯДА

Мельников А.В., Шуба М.В.

НИИУ «Институт ядерных проблем» БГУ, Минск, Беларусь

Исследования электромагнитных свойств углеродных нанотрубок (УНТ), в том числе многослойных УНТ (МУНТ) в настоящее время вызывают большой интерес в научном сообществе. Углеродные нанотрубки могут быть использованы при построении различных электромагнитных приборов, таких как поляризаторы, модуляторы, наноантенны терагерцового диапазона, а также в качестве наполнителей композитных материалов, применяемых для экранирования микроволнового излучения.

Ранее была построена модель рассеяния электромагнитного излучения на многослойной углеродной нанотрубке, которая описывалась набором вложенных друг в друга проводящих коаксиальных цилиндров, без учета возможности переноса заряда между слоями МУНТ [1]. Для такой структуры было получено дисперсионное уравнение, описывающее распространение поверхностных волн вдоль бесконечно длинных МУНТ. Была показана возможность распространения вдоль таких нанотрубок как синфазных волн, так и противофазных волн. Также была записана система интегральных уравнений Халлена, которая позволила решить задачу рассеяния электромагнитного излучения на МУНТ. На основе полученного решения было показано, что в спектре мнимой части поляризуемости МУНТ наблюдались резонансные пики, соответствующие резонансам поверхностных волн различных типов: синфазного и противофазного. Также ранее было установлено, что в МУНТ на низких частотах наблюдается эффект экранировки: большая часть тока течет по внешнему слою, а токи, текущие по внутренним слоям, подавляются [2].

В настоящей работе представлена модель двухслойной УНТ (ДУНТ), в которой учитывается возможность переноса заряда между слоями ДУНТ. Модель основана на интегро-дифференциальном уравнении Поклингтона, которое ранее позволило учесть возможность переноса заряда между двумя скрещенными трубками, имеющими точечный туннельный контакт [3]. Полученная модель предсказывает подавление интенсивности антенного резонанса противофазной поверхностной волны в ДУНТ за счет переноса заряда между слоями нанотрубки. Также эта модель может быть использована при моделировании УНТ, состоящей из соединенных через контакт участков УНТ с различной хиральностью и радиусом. Кроме того, с помощью предложенной модели можно смоделировать случай, когда внешний слой ДУНТ поврежден, что аналогично дефекту в структуре ОУНТ [4]. Для данного случая возможность межслойного переноса заряда совместно с эффектом экранирования, наблюдаемым в МУНТ, приводит к значительному изменению электромагнитного отклика ДУНТ в микроволновом диапазоне частот.

Библиографические ссылки

1. Shuba M.V. et al. / Phys. Rev. B. 2009. Vol. 79. P. 155403-1–155403-16.
2. Shuba M.V. et al. / Phys. Rev. B. 2013. Vol. 88. P. 045436-1 – 045436-8.
3. Melnikov A.V. et al. / Phys. Rev. B. 2021. Vol. 103. P. 045436-1 – 045436-13.
4. Shuba M.V. et al. / Phys. Rev. B. 2017. Vol. 96. P. 205414-1 – 205414-13.

ГЕТЕРОСТРУКТУРЫ ГРАФЕН/ЖИДКИЙ КРИСТАЛЛ КАК КОМПОНЕНТЫ ТЕРАГЕРЦОВОЙ ФОТОНИКИ

Мисиюк Ф.Ю., Поддубская О.Г., Волынец Н.И., Батраков К.Г

НИУ «Институт ядерных проблем» БГУ, Минск, Беларусь

Огромный интерес к ТГц технологиям в настоящее время связан с их многочисленными потенциальными приложениями. Устройства, содержащие жидкокристаллические материалы (ЖК), находят широкое применение при разработке и создании оптических компонент, принцип действия которых основан на проявлении линейных и нелинейных эффектов.

Известно, что при подаче низких электрических напряжений (несколько вольт) на ЖК ячейку возможно управлять ориентацией молекул нематических жидких кристаллов в широко исследуемом в настоящее время ТГц диапазоне частот [1].

Одной из сложностей использования ЖК ячеек в ТГц диапазоне является отсутствие высокопрозрачных электродов для данного диапазона. При исследовании ЖК ячеек в оптическом диапазоне частот чаще всего в качестве проводящего электрода используют пленки оксида индия-олова ИТО, однако такие пленки становятся сильно отражающими в ТГц диапазоне. Для решения данной проблемы в качестве проводящего электрода был использован CVD графен.

Для создания ЖК ячейки кварцевые подложки толщиной 2 мм были покрыты методом центрифугирования слоем фотоориентируемого полимера, при этом заданная толщина достигалась использованием спейсера. Ячейки были заполнены ЖК марки LC-VYIPS-P0.

Электромагнитные свойства ЖК ячеек толщиной 120 мкм и 150 мкм были исследованы методом ТГц спектроскопии с временным разрешением. Получены зависимости коэффициента прохождения ЖК ячейки от частоты падающего электромагнитного излучения при подаче переменного двуполярного напряжения в 1 кГц. Показано, что коэффициент прохождения системы, состоящей из двух ячеек без проводящего покрытия, может быть изменен путем вариации расстояния между ними.

Работа выполнена при поддержке Государственного комитета по науке и технологиям РБ (№ гранта Ф21АРМГ- 006).

Библиографические ссылки

1. Wang L. et.al. / Light Sci. Appl. 2015. Vol. 4, № 2. P. e253-e253.

ЭЛЕКТРОМАГНИТНЫЕ СВОЙСТВА КОМПОЗИЦИОННЫХ МАТЕРИАЛОВ НА ОСНОВЕ МНОГОСТЕННЫХ УГЛЕРОДНЫХ НАНОТРУБОК И АКРИЛОНИТРИЛБУТАДИЕНСТИРОЛА В ТЕРАГЕРЦОВОМ ДИАПАЗОНЕ

Москаленко В.Д., Бадьин А.В., Кулешов Г.Е., Суслев В.И., Ланин Е.В.

Национальный исследовательский Томский государственный университет, Томск, Россия

В последнее десятилетие наблюдается тенденция на создание композитных материалов для 3D-принтеров, содержащих многостенные углеродные нанотрубки (МУНТ) [1]. При добавлении небольшого количества МУНТ в полимерную матрицу могут наблюдаться высокие значения поглощения электромагнитного излучения. Электромагнитным откликом композитных материалов, содержащих МУНТ, можно управлять с помощью диаметра нанотрубок, изменения длины, количества слоев и расположения в матрице [2]. Изготовленные 3D печатью объекты на основе полимера с МУНТ характеризуются электропроводностью, высокой диэлектрической проницаемостью и механической прочностью. Создание таких материалов расширяет возможности изготовления элементов ТГц-диапазона [3].

Для исследования были напечатаны пять образцов композитных материалов методом послойного наплавления, которые содержали 1-4 масс. % МУНТ со средним диаметром 9,4 нм и акрилонитрилбутадиенстирола (АБС). МУНТ были получены путем каталитического газофазного осаждения этилена с использованием катализатора FeCo. Наполнитель добавлялся к АБС, растворенному в диметилкетоне, и полученная смесь обрабатывалась ультразвуком при 75 Вт в течение 10 минут. Измельченная полимеризованная смесь пропускалась через экструдер для формирования нитей для 3D-принтера диаметром 1,6 мм. Были изготовлены четыре образца с содержанием МУНТ от 1 до 4 масс. %. Для образца № 5 с 4 масс. % МУНТ этап ультразвукового диспергирования был пропущен. В результате методом 3D печати послойным наплавлением были получены пять образцов диаметром 20 мм и толщиной 0,55 мм, 0,61 мм, 0,51 мм, 1,14 мм и 0,53 мм соответственно.

С помощью терагерцового спектрометра во временной области Teravil T-SPEC 1000 был получен электромагнитный отклик образцов в диапазоне частот 0,1 - 1,6 ТГц. Установлено, что повышение концентрации МУНТ в образцах приводит к уменьшению коэффициента пропускания и увеличению коэффициента отражения электромагнитного излучения благодаря увеличению диэлектрической проницаемости и диэлектрических потерь. Анализ частотной зависимости коэффициента поглощения показывает, что с ростом частиц поглотителя в образце значения коэффициента поглощения увеличиваются вплоть до 95% на частотах свыше 600 ГГц. В результате диэлектрическая проницаемость композитных материалов, содержащих МУНТ, в терагерцовой области резко падает с увеличением концентрации нанотрубок и частоты [3]. Также показано, что влияние ультразвуковой обработки композиционной смеси в процессе производства материала в течение 10 мин. при мощности 75 Вт ведет к снижению значения диэлектрической проницаемости (в среднем ϵ' на 4% и ϵ'' на 21%).

Библиографические ссылки

1. Sezer H. K., Eren O. / J. Manuf. Process. 2018. Vol. 37. P. 339–347.
2. Sedelnikova O. V. et al. / Nanotechnology. 2018. Vol. 29. – 9 p.
3. Badin A.V., Simonova K.V., Kuleshov G.E. / Proc. 44st Int. Conf. Infrared Millimeter and Terahertz waves (IRMMW-THz), Paris, France, 2019. – 6 p.

СРАВНИТЕЛЬНОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ЦИТОТОКСИЧНОСТИ НАНОСТРУКТУРИРОВАННЫХ УГЛЕРОДНЫХ МАТЕРИАЛОВ

^{a,b}**Москвитина Е.Н., ^bКузнецов В.Л., ^bМосеенков С.И., ^bСеркова А.Н., ^bЗаворин А.В.**

^a *Сибирский федеральный научно-клинический центр ФМБА России, Томск, Россия*

^b *Институт катализа им. Г.К.Борескова, Новосибирск, Россия*

Развитие устойчивости бактерий к антибиотикам представляет серьезную мировую проблему. Уже сейчас мы сталкиваемся с инфекционными возбудителями, невосприимчивыми к одному, нескольким, или ко всем классам антибиотиков. В силу этого разработка новых альтернативных подходов в борьбе с возбудителями бактериальных и грибковых инфекций представляется актуальной задачей.

В данной работе мы исследовали наличие антимикробных свойств широкого набора углеродных наноматериалов (УНМ) и сравнили эффекты, вызванные ими на типичном распространенном условном патогене, а именно бактериях *E. Coli*. В исследовании использован системный набор УНМ, произведенных в России, в состав которого вошли тщательно охарактеризованные однослойные и многослойные углеродные нанотрубки (ОУНТ, МУНТ), каталитические углеродные нановолокна с различной ориентацией графеновых блоков (коаксиально-конической и стопочной, КВУ1 и КВУ2), углерод луковичной структуры (УЛС), ультрадисперсные детонационные наноалмазы (УДА). В качестве биологического объекта для изучения цитотоксических свойств был использован стандартный эталонный штамм Американской коллекции типовых культур *E.coli* ATCC 25922. В работе использованы методы световой и люминесцентной микроскопии (Nicon eclips E200 и Carl Zeiss Axiostar), окраску препаратов для люминесцентной микроскопии проводили флуорохромами пропидий йодид (PI), акридиновый оранжевый, Cyto9. Продукты взаимодействия *E. Coli* с УНМ исследованы с использованием растровой электронной микроскопии (JSM-6460LV и Hitachi SU8230).

Для оценки действия УНМ на микроорганизм бактерии *E.coli* суспендировали в дистиллированной воде, доводя до мутности, соответствующей 0,5 МакФарланда ($1,5 \times 10^8$ кое/мл). Затем суспензию с *E.coli* добавляли к УНМ, предварительно суспендированных в воде (~ 100 мкг/мл). Через сутки инкубирования в темноте при 35 °С (при перемешивании в качалке) производили посев 0,20 мкл суспензий на питательные среды. Еще через 24 - 48ч подсчитывали количество колоний. ОУНТ и УЛС практически не проявляли антимикробных свойств. Небольшое снижение количества *E.coli* вероятнее всего вызвано частичной агрегацией бактерий на поверхности УНМ и уменьшением общего количества не связанных, свободных микроорганизмов, которые могут образовывать отдельные колонии в эксперименте. Наибольшей противомикробной активностью обладали УДА, оба типа КВУ, а также суспензированные МУНТ. При изучении времени воздействия оказалось, что УДА и КВУ в концентрации 100 мкг/мкл практически полностью подавляли рост *E.coli* в течение часа, тогда как суспендированные МУНТ для достижения эффективного противомикробного эффекта требуется более длительное время воздействия – от 12 до 16 часов.

Вероятно, это объясняется разным физико-механическим воздействием этих УНМ на микроорганизм, а также за счет большей энергией адгезии *E.coli* на КВУ и УДА, чем у МУНТ. Данные РЭМ свидетельствовали, что УДА и оба типа КВУ прочно адсорбируют бактериальные клетки с их дальнейшим распадом, тогда как суспензионные МУНТ физически повреждают клеточную стенку и мембрану, для чего требуется более длительное воздействие. Полученные данные будут использованы для разработки новых материалов в биомедицине.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ 22-25-00715.

РАССЕЯНИЕ ИЗЛУЧЕНИЯ ДИМЕРОМ МЕТАЛЛИЧЕСКИХ НАНОЧАСТИЦ В ДАЛЬНОМ ИНФРАКРАСНОМ ДИАПАЗОНЕ

Мрочко В.Э., Шуба М.В., Зур И.А.

НИИУ «Институт ядерных проблем» БГУ, Минск, Беларусь

В металлических наночастицах с характерными размерами в сотни нанометров имеет место локализованный плазмонный резонанс в видимом и ближнем инфракрасном диапазонах частот. Этот резонанс активно исследуется и используется в нанооптике и наноплазмонике, так как на его частоте характерно существенное увеличение поглощения и рассеяния наночастиц, а также усиление поля в их ближней зоне. Чтобы сместить этот резонанс в область более низких частот, не меняя характерных размеров наночастицы, предложено использовать димер из наночастиц, в котором две металлические наночастицы соединены тонким проводящим каналом, частично препятствующим перетеканию заряда между наночастицами на высоких частотах. В качестве проводящего канала может быть выбран, например, лист графена, проводимостью которого можно варьировать посредством приложенного к нему напряжения, что позволяет перестраивать резонансную частоту димера. Показано, что массив из таких димеров можно использовать в качестве модулятора терагерцового излучения [1].

В настоящей работе в дальнем инфракрасном диапазоне исследованы оптические характеристики димера из металлических наностержней, соединенных однослойной углеродной нанотрубкой (УНТ). Задача рассеяния плоской оптической волны на таком димере решалась численно. При этом использовался метод конечных элементов для решения уравнений Максвелла.

Показано, что для димера с характерными размерами 100 – 500 нм имеет место локализованный плазмонный резонанс в диапазоне 10 - 25 ТГц. Этот резонанс еще называют плазмонным резонансом переноса заряда. Расчеты показывают, что резонанс смещается в область низких частот при увеличении диаметра и длины металлических наностержней, а также при увеличении длины УНТ и уменьшении ее электропроводности. Если УНТ является полупроводниковой, то ее электропроводность может изменяться под действием приложенного постоянного электрического поля. Таким образом, резонансным рассеянием рассматриваемого димера можно управлять внешним электрическим полем, многократно изменяя на заданной частоте его сечение поглощения и сечение рассеяния в дальнем инфракрасном диапазоне.

Результаты работы демонстрируют возможность создания наночастиц с управляемыми характеристиками резонансного рассеяния в дальнем ИК диапазоне, что может найти применение при разработке логических элементов и модуляторов дальнего ИК диапазона.

Библиографические ссылки

1. Ahmadivand A. et al. / Nanoscale. 2019. Vol. 11. P. 8091–8095.

ПОЛИМЕРНО-ДИСПЕРСНЫЕ КОМПОЗИТНЫЕ ЖИДКОКРИСТАЛЛИЧЕСКИЕ ПЛЕНКИ В ПАТЧ-АНТЕННАХ ДЛЯ 5G КОММУНИКАЦИЙ

^аНомоев А.В., ^бЧимытов Т.А., ^бБазарова Д.Ж., ^аГармаев Б.З., ^аАтутов Е.Б.,
^аБасанов Б.В., ^сКоровин А.Ю.

^а*Институт физического материаловедения СО РАН, Улан-Удэ, Россия,*

^б*Бурятский государственный университет им. Д. Банзарова, Улан-Удэ, Россия*

^с*Национальный исследовательский Томский государственный университет,
Томск, Россия*

Быстрое изменение резонансной частоты под действием напряжения смещения, малые габариты и потребляемая мощность по сравнению с полупроводниковыми аналогами относятся к преимуществам антенн с жидкими кристаллами. Анизотропия диэлектрических свойств нематических жидких кристаллов (НЖК) дает возможность изменять электрофизические параметры антенны и на высоких частотах. Введение наночастиц с высоким дипольным моментом значительно повышает диэлектрическую анизотропию жидких кристаллов, что позволяет изменять положение резонансной частоты антенны в более широком диапазоне.

В настоящей работе описывается конструкция патч-антенны, существенное изменение резонансной частоты которой под действием управляющего электрического поля, позволяет использовать ее как основу для фазовращателя. Толщина медного патча - 18 мкм. Полученная нами полимернодисперсная жидкокристаллическая пленка (ПДЖК) приготовлена с добавлением наночастиц металл/полупроводник Ag/Si в композицию НЖК + полимер, которая находится между патч-антенной и медной подложкой. Толщина ПДЖК слоя фиксированная и равна 60 мкм. Данные ячейки ПДЖК, содержащие модифицированные ЖК получали следующим образом. В качестве материалов для создания полимерно-дисперсных жидких кристаллов использовались следующие соединения: поливинилацетат и нематический жидкий кристалл (5CB). Для допирования исходной полимерно-жидкокристаллической смеси использовались наночастицы Ag/Si, концентрация добавляемых частиц составила 1 вес.%. После взвешивания приготовленной суспензии, смесь жидких кристаллов и наночастиц обрабатывалась ультразвуком в течение 10 мин при частоте 22 кГц и полученная композиция наносилась на медную подложку. После чего, подложка, с нанесенным жидким составом, помещалась в центрифугу, где вращалась при частоте - 3000 об/мин с целью равномерного распределения по поверхности подложки. При испарении растворителя происходит фазовое разделение «жидкий кристалл - полимер». В результате образуется пленка ПДЖК, содержащая капли жидких кристаллов. После полного испарения растворителя подложка с ПДЖК и медным патчем, расположенным сверху, подвергается термообработке для полимеризации и медленному охлаждению до комнатной температуры. Поскольку патч-антенны не являются оптически прозрачными, то для контроля качества наносимого ПДЖК слоя изготовленные нами патч-антенны охлаждались до температуры 5-10 °С, что существенно ниже температуры фазового перехода для ЖК 5CB равного 35 °С. При охлаждении ПДЖК пленка меняет свой цветовой оттенок: ПДЖК, как вне подложки, так и внутри становится темнее, обусловленным фазовым переходом молекул жидкого кристалла и является косвенным признаком работоспособности наносимых нами ПДЖК пленок.

Проведены измерения коэффициента отражения и КСВН (SWR) изготовленной патч-антенны с ячейкой ПДЖК без наночастиц, а также ПДЖК с наночастицами с частотами до 30 ГГц.

СТРУКТУРА И СВОЙСТВА КОМПОЗИТОВ НА ОСНОВЕ НАТРИЕВОЙ СОЛИ ПОЛИАКРИЛОВОЙ КИСЛОТЫ И МАКСЕНА (Ti_3C_2).

Оводок Е.А., Позняк С.К., Мальтанова А.М., Ивановская М.И., Гаевская Т.В.

Научно-исследовательский институт физико-химических проблем БГУ, Минск, Беларусь

Максены (Ti_3C_2) являются новыми 2D материалами, использование которых перспективно в различных областях, таких как хранение энергии, материалы для защиты от электромагнитных помех, армированные композиты, газо- и биосенсоры, смазочные материалы, фото-, электро- и химические катализаторы [1]. Актуальной задачей является получение полимерных композитов, позволяющих сохранять электрические и оптические свойства частиц Максена. Использование натриевой соли полиакриловой кислоты (ПААNa) для создания полимерной матрицы композита, позволяет улучшать смачиваемость поверхности подложек, что способствует формированию однородных проводящих пленок Максена/ПААNa. Целью данной работы является получение тонких композитных пленок Максена/ПААNa и изучение их структуры и электрических свойств.

Коллоидный раствор Максена (5 г/л) смешивали с ПААNa в различных соотношениях и наносили на стеклянную подложку ($S = 1,4 \text{ см}^2$) методом распыления. Количество наносимого материала контролировали по изменению массы подложки. Электрическое сопротивление образцов измеряли с помощью мультиметра APPA 505 True RMS двухточечным методом. По данным СЭМ толщина пленок Максена/ПААNa составляла около 500 нм.

Композитная пленка Максена(90 мас. %)/ПААNa характеризуется близким значением электрического сопротивления к пленке Максена ($2,4 \times 10^{-6} \text{ Ом} \times \text{м}$). Снижение содержания Максена до 58 % приводило к увеличению сопротивления композита в 3,6 раза. Более резкий рост электрического сопротивления композита наблюдали при дальнейшем уменьшении содержания Максена в композите. Для образца Максена/ПААNa, содержащего 8 % Максена, сопротивление составляло $2,3 \times 10^{-3} \text{ Ом} \times \text{м}$.

Пленка чистого MXene характеризуется слоистой структурой. Отдельные Ti_3C_2 2D-частицы накладываются друг на друга, что обеспечивает хороший контакт между ними и обуславливает низкое сопротивление пленок Максена. В пленочных композитах Максена/ПААNa сохраняется слоистая структура, при этом толщина слоев увеличивается. Толщина слоев в композитной структуре увеличивалась с увеличением количества полиэлектролитной добавки. Полиэлектролит ПААNa сорбируется на поверхности частиц Максена, с одной стороны ухудшая контакт между отдельными 2D-частицами и увеличивая сопротивление пленки Максена/ПААNa, с другой препятствует воздействию окружающей среды. Установлено, что при повышении влажности наблюдается резкий скачок сопротивления пленки Максена. Увеличение сопротивления композитных пленок Максена/ПААNa при повышении влажности происходит значительно медленнее.

Показали возможность использования пленок Максена/ПААNa для удаления обледенения с легких полимерных конструкций, путем приложения различных величин напряжения и контроля локального изменения температуры с помощью тепловизионной инфракрасной камеры.

Работа выполнена в рамках НИР 2.1.04.02 ГПНИ «Химические процессы, реагенты и технологии, биорегуляторы и биооргхимия», 2021–2025.

Библиографические ссылки

1. Naguib M. et al. / Adv. Mater. 2021. Vol. 33. P. 2103393.

ТЕРМИЧЕСКАЯ И КАТАЛИТИЧЕСКАЯ ГРАФИТИЗАЦИЯ АЛМАЗНЫХ ГРАНЕЙ

аОкотруб А.В., ^аГородецкий Д.В., ^бПальянов Ю.Н., ^сЧувилин А.Л., ^аБулусева Л.Г.

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

^бИнститут геологии и минералогии им. С.Л. Соболева СО РАН, Новосибирск, Россия

^сCIC nanoGUNE Consolider, Сан-Себастьян, Испания

Нагрев кристаллов алмаза до температуры 1200°C приводит к формированию на его поверхности слоя графитового углерода. Предполагается, что строение и форма образующихся графеновых частиц зависит от симметрии грани алмаза. В работе проведено исследование шлифованных и натуральных граней искусственных алмазов, синтезированных методом НРНТ. Кристаллы алмаза с размером граней, превышающим размер фокуса рентгеновского луча, падающего на образец, были нагреты в высоковакуумной камере российско-германской лаборатории на синхротронном источнике BESSY II при температуре 1000-1400°C в течение 15 минут. Методом РФЭС-спектроскопии изучена структура углеродных слоев на гранях алмазов различной симметрии и с нанесенными на алмаз тонкими слоями железа и никеля. Показана высокая скорость графитизации грани (111) по сравнению с (100). Данные просвечивающей электронной микроскопии демонстрируют характерный размер и ориентацию отдельных слоев графена для различной симметрии граней алмаза. Проведены измерения угловой зависимости спектров СК- края поглощения в области напыления пленок железа и никеля. Наблюдается резкое изменение монотонного хода зависимости относительной интенсивности π^* - и σ^* -полос СК- края спектра поглощения, что является свидетельством направленности части графитовых слоев перпендикулярно поверхности. Данные просвечивающей электронной микроскопии демонстрируют характерный размер и ориентацию отдельных слоев графена для граней алмаза различной симметрии. Предложена модель формирования графеновых слоев под действием взаимодействия нанокластеров железа и никеля с алмазной поверхностью. Выявлены ряд особенностей взаимодействия пленок молибдена и титана с поверхностью монокристалла алмаза при температуре отжига до 800°C.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФ 22-72-10097.

ИССЛЕДОВАНИЕ ОСОБЕННОСТЕЙ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ПЛЕНОК MoS_2 С ЛИТИЕМ И НАТРИЕМ

Окотруб А.В., Федоренко Н.Д., Городецкий Д.В., Гусельников А.В., Булушева Л.Г.

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

Низкоразмерные дихалькогениды являются перспективными компонентами для синтеза анодных материалов для щелочного металла – ионных батарей. В электрохимических устройствах движущей силой проникновения ионов щелочных металлов из электролита в межплоскостное пространство анода является электрический потенциал. Проведение *in situ* исследований таких процессов методом рентгеноэлектронной спектроскопии представляется практически невозможным. В данной работе исследованы электронные состояния пленки MoS_2 при взаимодействии с осажденными на поверхность атомами щелочных металлов в условиях высокого вакуума.

Напыление тонких пленок молибдена на подложки проводили на установке магнетронного напыления. Подложки отжигали при 300°C и осуществляли напыление молибдена в течение 5 и 90 сек при потребляемой магнетроном мощности 100 Вт. Были получены образцы **1** (толщина 2 нм) и **2** (толщина 30 нм). Сульфидирование пленок проводилось на лабораторном CVD-реакторе при 500°C парами молекулярной серы. Используя методы Рамановской спектроскопии было обнаружено, что в спектре более толстой пленки увеличена интенсивность полосы E_{1g} , соответствующего краям фрагментов MoS_2 . Полученные данные свидетельствуют, что слои MoS_2 в тонкой пленке ориентированы параллельно поверхности, а в толстой перпендикулярно.

Исследование процессов, происходящих в пленках MoS_2 при напылении натрия и лития, проводилось методом РФЭС на станции RGBL (BESSY II, Германия). Изменения в $\text{Mo}3d$ и $\text{S}2p$ спектрах исследуемых пленок после напыления разной толщины слоев лития и натрия связаны с образованием полисульфидов молибдена и сульфидов щелочных металлов.

Работа выполнена при финансовой поддержке проекта РФФИ № 21-53-12021.

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ УЛЬТРАЗВУКОВОЙ ОБРАБОТКИ ДЛЯ ПОЛУЧЕНИЯ НАНОПОРОШКА ФЕРРОМОЛИБДАТА СТРОНЦИЯ

Петров А.В., Каланда Н.А., Ярмолич М.В.

ГО «НПЦ НАН Беларуси по материаловедению», Минск, Беларусь

К наиболее перспективным материалам для спинтроники относятся полуметаллические ферримагнетики $\text{Sr}_2\text{FeMoO}_{6-\delta}$ с упорядоченной структурой двойного перовскита ввиду высокой химической стабильности в восстановительной атмосфере, большими значениями температуры Кюри (~ 420 К), высокой степени спиновой поляризации электронов проводимости ($\sim 100\%$), а также низкими значениями управляющих магнитных полей ($B < 0,5$ Тл) [1]. Одной из главных проблем спинтроники является совершенствование метода их получения.

Однофазные порошки $\text{Sr}_2\text{FeMoO}_{6-\delta}$ были синтезированы из исходных реагентов $\text{Sr}(\text{NO}_3)_2$, $\text{Fe}(\text{NO}_3)_3 \cdot 9\text{H}_2\text{O}$, $(\text{NH}_4)_6\text{Mo}_7\text{O}_{24}$ и моногидрата лимонной кислоты $\text{C}_6\text{H}_8\text{O}_7 \cdot \text{H}_2\text{O}$ марки “ОСЧ” модифицированным цитрат-гель методом [2, 3]. На основании результатов сканирующей электронной и атомно-силовой микроскопии, а также данных по динамическому рассеянию света было установлено, что в полученном порошке ферромолибдата стронция наблюдалась агломерация размерами от $\sim 0,7$ мкм до 1,2 мкм.

Для получения высокодисперсных частиц ($d_{\text{ср}} < 100$ нм) использовалось ультразвуковое диспергирование. В качестве жидкой среды был выбран этиловый спирт в виду того, что он не вступал в химическое взаимодействие и в нем не обнаружено химического разложения двойного перовскита. Для оптимизации процесса диспергирования порошка $\text{Sr}_2\text{FeMoO}_{6-\delta}$, подверженного ультразвуковому воздействию необходимо было изучить влияние времени и мощности излучения ультразвукового гомогенизатора на дисперсность исследуемых частиц.

В ходе исследований проводилось варьирование мощности ультразвукового воздействия от 1% до 100% номинальной мощности (P_N) с шагом 25% при частоте $\nu = 22$ кГц и времени воздействия от 15 до 60 мин с шагом 15 мин в спиртовом растворе. Объем жидкой суспензии составлял $V = 25$ мл. При изучении влияния мощности ультразвукового воздействия на дисперсность порошка ферромолибдата стронция обнаружено, что постепенный рост мощности вводимых ультразвуковых колебаний до $P = 75\%P_N$ ведет к увеличению дисперсности частиц $\text{Sr}_2\text{FeMoO}_{6-\delta}$. Кроме того, при временах воздействия до 45 минут идет эффективное диспергирование частиц во всем объеме до $d_{\text{ср}} \sim 240$ нм, что препятствует процессам коагуляции и осаждения частиц. Замечено, что дальнейшее увеличение мощности ультразвукового излучения до $P = 100\%P_N$ при увеличении длительности ультразвукового излучения до 60 минут средний размер частиц возрастает до 450 нм. Несмотря на позитивные результаты, тем не менее, следует указать на их неустойчивость, что указывает на необходимость использования поверхностно активных веществ. Обнаружено, что наиболее подходящим оказался неионогенный Tween 20 ПАВ, на котором и были получены основные результаты. Таким образом установлено, что размеры агломератов порошка ферромолибдата стронция после ультразвукового воздействия при $P = 75\%P_N$ в течение 60 минут, плавно уменьшаются и зерна достигают 69,3 нм.

Работа выполнена при финансовой поддержке проектов №29–2021 и БРФФИ № Ф21У-003.

Библиографические ссылки

1. Serrate D. et. al. / J. Phys.: Condens. Matter. 2007. Vol. 19. P. 1–86.
2. Yarmolich M. et. al. / Beilstein J. Nanotechnol. 2016. Vol.7. P. 1202–1207.
3. Yarmolich M. et. al. / Inorg. Mater. 2017. Vol.53(1). P. 96–102.

СХЕМА ГЕНЕРАЦИИ ПОТОКА ОТРИЦАТЕЛЬНО ЗАРЯЖЕННЫХ МОЛЕКУЛ НА ИЗОГНУТЫХ ЛИСТАХ ГРАФЕНА

Поклонский Н.А., Раткевич С.В., Вырко С.А., Власов А.Т.

Белорусский государственный университет, Минск, Беларусь

Для ряда задач высокоэнергетической ионной имплантации, ускорительной масс-спектрометрии, сверхколлимированных пучков ионов и других требуется разработка источников отрицательных ионов [1]. Обозначим некоторые подходы к получению потоков ионов и электрически нейтральных радикалов. Так, предложена методика удаления десорбированных (с инженерных поверхностей ускорительных устройств) ионов из общего потока ионов фильтром, который пропускает от источника к детектору только газофазные ионы и задерживает десорбированные благодаря разнице их кинетических энергий [2]. При этом необходимо учитывать взаимодействие адсорбата (молекулярного иона) с поверхностью ионного фильтра (например, из кристаллического полупроводника), которое приводит к изгибу зон разрешенных значений энергии, и далее — к пиннингу уровня Ферми на поверхности полупроводника [3]. На основе модели регибридизации (из-за сдвига sp^2 -гибридизации на каждом узле гексагональной решетки графена) показано [4], что нормальная к поверхности графенового листа электрическая поляризация (в виде двойного электрического слоя) зависит от кривизны листа, причем электронный заряд π -связей атомов углерода «перетекает» на выпуклую сторону листа. При прокачке водяного пара между обкладками электрического «конденсатора» (в виде двух одинаково изогнутых электропроводящих листов графена) водяной пар на выходе из конденсатора обогащается электрически нейтральными радикалами $(OH)^0$ и молекулами водорода [5].

В данном сообщении предлагается простая схема получения потока отрицательно заряженных молекул из потока электрически нейтральных молекул при их перезарядном взаимодействии с изогнутыми в противоположные стороны двумя электропроводящими листами графена. Два изогнутых в виде сопла Лаваля графеновых листа (выпуклых друг к другу) электромеханически закреплены по краям на двух плоских подложках из химически инертного металла (см. также [5]). Подложки подключены к внешнему источнику постоянного электрического напряжения: отрицательный потенциал подан на две подложки (катоды), а на расположенный вдали от катодов (перпендикулярно потоку молекулярных ионов) анод в виде металлической сетки подан положительный потенциал.

На изогнутых листах графена возникает локальный электрический дипольный момент за счет асимметрично вытянутых π -связей атомов углерода (направление дипольного момента определяется плотностью π -электронных состояний, которая больше с выпуклой стороны графенового листа [6]). Поэтому изогнутая графеновая поверхность оказывается химически реактивно способной для соединения с частично положительно заряженными атомами водорода в молекулах воды [5, 6]. При этом в молекулах наименьший незаполненный электронами уровень энергии (относительно уровня энергии вакуума) должен быть расположен ниже, чем наивысший уровень энергии заполненных электронами π -состояний s - или v -зоны изогнутого графена, что и делает возможным переходы электронов из графена на молекулы и образование из них отрицательных ионов.

Библиографические ссылки

1. Дудников В.Г. / УФН. 2019. Т. 189. С. 1315–1351.
2. Лукин В.Г., Хвостенко О.Г. / УФН. 2020. Т. 190. С. 525–538.
3. Киселев В.А. / ФТТ. 1991. Т. 33. С. 3070–3076.
4. T. Dumitrică et al. / Chem. Phys. Lett. 2002. Vol. 360. P. 182–188.
5. Poklonski N.A. et al. / Int. J. Nanosci. 2019. Vol. 18. P. 1940008 (1–5).
6. Gao X. et al. / Phys. Chem. Chem. Phys. 2011. Vol. 13. P. 19449–19453.

DFT МОДЕЛИРОВАНИЕ КОНЬЮГАТА КАРБОПЛАТИН – ФУЛЛЕРЕНОЛ КАК ПЕРСПЕКТИВНОЙ ОСНОВЫ ПРОТИВООПУХОЛЕВОЙ ТЕРАПИИ

^aПушкарчук А.Л., ^aБезъязычная Т.В., ^aПоткин В.И., ^aДикусар Е.А.,
^{a, b}Солдатов А.Г., ^cКишин С.Я., ^cНизовцев А.П., ^dКутень С.А., ^eПушкарчук В.А.,
^fDominik Ludewig Michels, ^fDmitry Lyakhov, ^gКульчицкий В.А.

^aИнститут физико-органической химии НАНБ, Минск, Беларусь

^bГО «Научно-практический центр НАНБ по материаловедению», Минск, Беларусь

^cИнститут физики им. Б.И.Степанова НАНБ Минск, Беларусь

^dНИУ «Институт ядерных проблем» БГУ, Минск, Беларусь,

^eБелорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники, Минск, Беларусь

^fComputer, Electrical and Mathematical Science and Engineering Division, 4700 King Abdullah University of Science and Technology, Thuwal, Saudi Arabia

^gИнститут физиологии НАН Беларуси, Минск, Беларусь

В работе изложены результаты компьютерного моделирования методом DFT структурных и электронных характеристик конъюгата $C_{60}(OH)_{24}$ – CBDCA сформированного на основе фуллеренола $C_{60}OH_{24}$ и цитотоксического препарата карбоплатина ($C_6H_{12}N_2O_4Pt$ или CBDCA), а также предложены возможные механизмы формирования биологической активности данного конъюгата. С этой целью в рамках метода DFT/M062X/cc-pvdz/LANL2DZ, с использованием программного пакета Gaussian16 проведены расчеты, как для индивидуальных соединений, так и для их конъюгатов в двух вариантах: изолированные молекулы в вакууме и в водной среде, что имитирует ситуацию в живых клетках. Водная среда моделировалась в приближении РСМ.

Расчет электронной структуры проводился с целью выяснить зависимость биологической активности изучаемых структур от их состава и электронной структуры на основе анализа энергетического положения таких дескрипторов биологической активности, как граничные орбитали (ГО).

Установлено, что конъюгаты $C_{60}(OH)_{24}$ – CBDCA в водном растворе формируют устойчивые нековалентно связанные комплексы при этом показано, что связи Pt-O ослабевают, а Pt-N усиливаются, что облегчает отрыв остатков карбоплатина содержащих Pt от конъюгата. Это может привести к повышению противоопухолевых свойств карбоплатина, за счет более свободного передвижения атома Pt.

Установлено, что в случае учета растворителя, возрастает вклад d –орбиталей атома Pt в формирование ГО., что приводит к повышению вероятности прямого участия атомов Pt в реакциях, обуславливающих биологическую активность данного конъюгата.

Показано, что в случае формирования комплекса $C_{60}(OH)_{24}$ – CBDCA, фуллеренол является не просто инертным носителем биологически активного препарата CBDCA, но и повышает биологическую активность конъюгата по сравнению с CBDCA, за счет участия молекулы $C_{60}(OH)_{24}$ в первичном акте взаимодействия конъюгата при сближении с белковой мишенью.

Совокупностью этих факторов объясняет усиление противоопухолевого эффекта карбоплатина при его взаимодействии с фуллеренолом.

Работа выполнена в рамках ГПНИ «Конвергенция 2025» И гранта БРФФИ №T22Мн-005 от 04.05.2022 г.

All Gaussian 16 package computations were performed on KAUST's Ibex HPC. The authors thank the KAUST Supercomputing Core Lab team for assistance with execution tasks on Skylake nodes.

МОДЕЛИРОВАНИЕ НАНОКОМПОЗИТА ГРАФЕН/ПММА МЕТОДОМ КВАНТОВОЙ ХИМИИ

^{a, b} Пушкарчук А.Л., ^bХлопина Т.С., ^bКутень С.А., ^bБатраков К.Г.,
^cDominik Ludewig Michels, ^cDmitry Lyakhov

^aИнститут физико-органической химии НАНБ, Минск, Беларусь

^bНИУ «Институт ядерных проблем» БГУ, Минск, Беларусь

^cComputer, Electrical and Mathematical Science and Engineering Division, 4700 King Abdullah University of Science and Technology, Thuwal, Saudi Arabia

С момента экспериментального получения графена [1], он нашел широкое применение во многих областях физики и техники. Одним из самых перспективных применений является область нано-электроники. Этому способствует рекордно высокая подвижность носителей заряда графена, являющейся следствием необычности его электронной структуры, в частности, безмассовому дираковскому энергетическому спектру электронов. Один атомный слой графена поглощает ~ 2.3% падающего излучения в оптическом диапазоне спектра и до 20 – 30% в микроволновом и терагерцовом диапазонах, что открывает использование графеновых структур в качестве поглотителя для уменьшения перекрестных электронных помех в плотно упакованных электронных устройствах. Графен используется в нано-антеннах, нано-транзисторах, в других элементах нано-плазмоники. Как правило, во всех этих устройствах графен плотно граничит с другими материалами, которые или также являются двумерными слоями или используются в качестве подложки. Такое соседство модифицирует электронную структуру графена, его электродинамические и механические свойства. Одним из материалов, используемым для переноса и размещения графена является полиметилметакрилат (ПММА). Поэтому, влияние ПММА на атомарную и электронную структуру графена представляет большой интерес.

В данной работе представлены квантово-химические расчеты атомной и электронной структуры ПММА/ГКТ (графеновая квантовая точка). ГКТ моделировались набором графеноподобных структур, насыщенных атомами водорода: C₁₆H₁₀ и C₂₄H₁₂. Полимер ПММА моделировался олигомерами с конечным числом мономеров ММА (молекула метилметакрилата), связанных между собой.

Проведена полная оптимизация геометрии изучаемых структур и рассчитаны их электронные свойства с использованием уровня теории DFT/M062X/cc-pvdz, с применением функционала M062X, который позволяет учитывать межмолекулярное взаимодействие и корректно передает механизм переноса электронов в системе при возбуждении. Для расчетов использован программный пакет Gaussian16.

Установлено, что ПММА/ГКТ формируют устойчивые нековалентно связанные комплексы.

Исследовано формирование электронной структуры комплекса в процессе его формирования. Установлено, что в запрещенной зоне ГКТ при образовании комплекса формируется ряд состояний. Проанализирована пространственная локализация волновых функций советующих краям валентной зоны и зоны проводимости ГКТ и комплекса, а также состояниям в запрещенной зоне.

Работа выполнена при поддержке гранта Ф21АРМГ-006 Белорусского республиканского фонда фундаментальных исследований.

All Gaussian 16 package computations were performed on KAUST's Ibex HPC. The authors thank the KAUST Supercomputing Core Lab team for assistance with execution tasks on Skylake nodes.

Библиографические ссылки

1. Novoselov K.S. et al. / Science. 2004. 306 (5696). P. 666–669.

СТРУКТУРНЫЕ, ЭЛЕКТРОННЫЕ И ОПТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ДВУХ NV-ЦЕНТРОВ В НАНОАЛМАЗЕ КАК МОДЕЛИ КВАНТОВОГО ИЗЛУЧАТЕЛЯ: КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ

^aПушкарчук В.А., ^bНизовцев А.П., ^bМогилевцев Д.С., ^bКишин С.Я., ^cПушкарчук А.Л., ^dКутень С.А., ^eDominik Ludewig Michels, ^eDmitry Lyakhov

^aБелорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники, Минск, Беларусь

^bИнститут физики им. Б.И.Степанова НАНБ Минск, Беларусь,

^cИнститут физико-органической химии, НАНБ. Минск, Беларусь

^dНИУ «Институт ядерных проблем» БГУ, Минск, Беларусь

^eComputer, Electrical and Mathematical Science and Engineering Division, 4700 King Abdullah University of Science and Technology, Thuwal, Saudi Arabia

Квантовая антенна, состоящая из двух двухуровневых эмиттеров, может быть реализована с помощью пары центров окраски в алмазе. Наиболее известным и изученным среди них является центр окраски «азот-вакансия» (NV центр), обладающий уникальным набором взаимосвязанных фотофизических и спиновых свойств, которые и используются для разнообразных применений NV центров. В связи с этим, актуальным является выполнение прямого компьютерного моделирования методами квантовой химии системы двух NV центров, расположенных недалеко друг от друга в кластере алмаза.

В качестве модели для моделирования был выбран кластер $C_{143}[2NV]^-H_{102}$, содержащий два отрицательно заряженных NV центра, ориентированных различным образом. Оборванные связи на поверхности кластера были пассивированы водородом. Для данного кластера были рассчитаны равновесная атомарная структура, электронная структура, спиновые свойства и спектр поглощения. Расчеты проводились методами DFT/B3LYP/3-21G и TDDFT/B3LYP/3-21G с использованием программного пакета ORCA5.0.3.

Установлено, что спиновая плотность в таком кластере локализована в основном на шести атомах углерода, являющихся ближайшими соседями вакансий двух NV центров. Кроме того, в запрещенной зоне кластера сформировались два вакантных состояния, волновые функции которых, также локализованы на ближайших соседях вакансий двух NV центров. Именно в этих областях локализованы также два дипольных момента, ответственных за генерацию этими NV центрами излучения.

Рассчитанный спектр поглощения для кластера $C_{143}[2NV]^-H_{102}$, состоит из трех линий, имеющих разные частоты (энергии переходов) и силы осцилляторов. Данный спектр демонстрирует наличие трех характерных переходов с энергиями 2.192, 2.256 и 2.367 эВ, имеющих силы осцилляторов 0.066, 0.0176 и 0.0428, соответственно. Полученный спектр можно интерпретировать как спектр двухчастичной системы, состоящей из двух двухуровневых NV центров, взаимодействующих друг с другом и имеющих различные частоты оптических переходов. Вместо одного перехода, имеющего место в случае одиночного квантового излучателя – одиночного NV центра, в системе двух взаимодействующих NV центров формируются три частоты резонансных переходов.

Таким образом, показано что, в запрещенной зоне двухцентровых кластеров формируются дублетные состояния, соответствующие симметричным и антисимметричным состояниям взаимодействующих излучателей и, следовательно, возможно создание квантового излучателя, состоящего из пары эмиттеров, которыми являются два NV⁻ центра.

Работа выполнена в рамках ГПНИ «Конвергенция 2025». All ORCA package computations were performed on KAUST's Ibex HPC. The authors thank the KAUST Supercomputing Core Lab team for assistance with execution tasks on Skylake nodes.

СТРУКТУРНЫЕ И ЭЛЕКТРОННЫЕ СВОЙСТВА КОНЬЮГАТА ГРАФЕНОВАЯ КВАНТОВАЯ ТОЧКА-МОЛЕКУЛА ДОКСОРУБИЦИНА: DFT МОДЕЛИРОВАНИЕ

^{a,b}Пушкарчук А.Л., ^{b,c}Хлюпина Т.С., ^bКулагова Т.А., ^bГолубева Е.Н., ^cМигас Д.Б.,
^dDominik Ludewig Michels, ^dDmitry Lyakhov

^aИнститут физико-органической химии НАНБ, Минск, Беларусь

^bНИУ «Институт ядерных проблем» БГУ, Минск, Беларусь

^cБелорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники,
Минск, Беларусь

^dComputer, Electrical and Mathematical Science and Engineering Division, 4700 King Abdullah
University of Science and Technology, Thuwal, Saudi Arabia

В работе представлены результаты квантово-химического моделирования атомарной и электронной структуры графеновой квантовой точки (GQD) и конъюгата графеновая квантовая точка – доксорубицин - (GQD – DOX). Доксорубицин (DOX) является одним из химиотерапевтических средств, которое используется при лечении онкологических заболеваний. Однако, недостатком DOX является его плохая избирательность по отношению к клеткам–мишеням и неконтролируемое распределение по организму, что вызывает серьезные побочные эффекты. В связи с этим, требуется разработка нетоксичных носителей доксорубицина для направленной доставки препарата в опухолевую ткань, которые обладают высокой проницаемостью в ткани, нагрузочной способностью и контролируемым высвобождением лекарственного средства. Графеновые квантовые точки, вероятно, являются одним из таких носителей.

В рамках квантово-химического метода DFT/M062X/cc-pvdz, проведены расчеты как для индивидуальных соединений (GQD, DOX), так и для их конъюгатов (GQD – DOX) в вакууме и в водной среде, что имитирует цитоплазму живых клеток. Проведено моделирование для GQD, состоящей из 114 атомов углерода и содержащей 10 гидроксильных групп (GQD_C₁₁₄H₂₀(OH)₁₀), размером 1,71×1,86 нм. Водная среда моделировалась в приближении РСМ. Этим же методом проведены расчеты спектров комбинационного рассеяния света изучаемых структур.

Сравнительный анализ электронной структуры DOX и конъюгата GQD_C₁₁₄H₂₀(OH)₁₀–DOX в вакууме показал, что ΔE (ΔE = E_{нomo} - E_{лumo} – разность энергий низшей свободной и высшей занятой молекулярных орбиталей) уменьшается с 5.6326 до 3.6189 эВ, следовательно, можно предполагать формирование устойчивого комплекса молекул. Положение граничных орбиталей (ГО) для DOX изменяется при попадании молекулы в водную среду (ΔE уменьшается с 5.6326 до 5.5487 эВ.). При помещении комплекса GQD_C₁₁₄H₂₀(OH)₁₀–DOX в водное окружение выявлено незначительное изменение ΔE от 3.6189 до 3.6289 эВ. Определена локализация электронных орбиталей вносящих основной вклад в комплексообразование GQD_C₁₁₄H₂₀(OH)₁₀–DOX в воде и в вакууме.

Дипольный момент GQD, полученный после оптимизации геометрии, составил 5,81 Д, после образования комплекса с DOX он заметно увеличился до 9,59 Д. При попадании GQD_C₁₁₄H₂₀(OH)₁₀–DOX в водную среду дипольный момент становится равным 18,17 Д, что значительно выше дипольных моментов DOX и GQD и указывает на повышение гидрофильности комплекса и его устойчивости.

Таким образом, уменьшение ΔE и увеличение дипольного момента конъюгата GQD_C₁₁₄H₂₀(OH)₁₀–DOX в водной среде свидетельствует о том, что формирование комплекса из молекул GQD и DOX повышает их стабильность, водорастворимость и, следовательно, будет способствовать беспрепятственному распределению в живых системах.

КРИТИЧЕСКИЕ УСЛОВИЯ ПОТЕРИ ГОМОГЕННОСТИ ПСЕВДООЖИЖЕННОГО СЛОЯ ПРИ КАТАЛИТИЧЕСКОМ СИНТЕЗЕ МУНТ

**^аРабинович О.С., ^аМалиновский А.И., ^аЛях М.Ю., ^бКузнецов В.Л., ^бМосеенков С.И.,
^бЗаворин А.В., ^бГолубцов Г.В., ^бГойдин В.В.**

^а *Институт тепло- и массообмена им. А.В. Лыкова НАНБ, Минск, Беларусь*

^б *Институт катализа им. Г.К. Борескова СО РАН, Новосибирск, Россия*

Каталитический синтез многостенных углеродных нанотрубок (МУНТ) из углеродсодержащих газов в псевдоожигенном слое (ПС) в настоящее время является хорошо разработанной технологией, имеющей ряд несомненных преимуществ по отношению к другим методам получения МУНТ. Использование катализаторов с высокой эффективностью (100 г МУНТ и более на 1 г катализатора) позволило достигнуть рекордных удельных производительностей процесса – около 1 кг МУНТ в час в реакторе с поперечным диаметром 0.25 м – при низком остаточном содержании катализатора в продукте (менее 5 %) и узком распределении по диаметрам получаемых МУНТ.

Одной из серьёзных проблем, сдерживающих широкое применение рассматриваемой технологии, является потеря однородности ПС. При определённых условиях, зависящих от типа катализатора и числовой плотности его частиц в реакторе, происходит образование больших кластеров МУНТ, оседающих на дно и стенки реактора, возникают струйные течения газа и сильные пульсации давления. В конечном счете это приводит к снижению производительности и степени конверсии реагентов, ухудшению качества синтезируемых МУНТ. Задача определения конкретных причин и условий, приводящих к этому негативному явлению, является практически важной.

В работе [1] на основании обширного экспериментального материала показано, что главной причиной образования больших кластеров при синтезе МУНТ является высокая когезия первичных и вторичных агломератов МУНТ, характерная для определённых типов катализаторов. Когезионные свойства агломератов МУНТ проявляются особенно сильно в начальный период роста нанотрубок, порядка 10 минут. Это обстоятельство подсказывает путь к предотвращению образования больших кластеров МУНТ: необходимо, чтобы после загрузки свежего катализатора числовая плотность его частиц не была слишком большой. В той же работе предложена приближённая теоретическая модель, позволяющая предсказать условия потери гомогенности ПС.

В настоящей работе, с целью более полного понимания процессов, приводящих к образованию больших кластеров МУНТ при их синтезе, проведено моделирование псевдоожигенного слоя методом дискретных частиц (дискретных элементов, DEM). Выбор параметров использованной модели, главным среди которых является энергия когезии первичных кластеров, основан на сопоставлении результатов моделирования с экспериментальными характеристиками движения слоя МУНТ в горизонтальном вращающемся барабане. Анализ поведения псевдоожигенного слоя МУНТ в реакторе с ПС основан на расчётных данных о зависимости средней относительной скорости движения агломератов и радиальной функции их распределения от энергии когезии и концентрации агломератов с высокой когезией. Показано, что при высокой энергии когезии существует достаточно резкая граница по концентрации активных в когезионном отношении агломератов МУНТ, разделяющая режимы с гомогенным псевдоожигением от режимов образования больших кластеров. Эти результаты позволяют выработать практические критерии для выбора катализаторов и режимных параметров процесса, обеспечивающих высокопроизводительный каталитический синтез МУНТ в ПС.

Библиографические ссылки

1. Kuznetsov V.L. et al. / Chem. Eng. J. 2022. Vol. 447. P. 137391.

ИССЛЕДОВАНИЯ МЕТАЛЛО-УГЛЕРОДНЫХ НАНОСТРУКТУР ЯДЕРНО-ФИЗИЧЕСКИМИ МЕТОДАМИ

Ремизов М.В., Лебедев В.Т., Козлов В.С.

Петербургский институт ядерной физики им. Б.П.Константинова, НИЦ «Курчатовский институт», Гатчина, Россия

Обсуждаются применения ядерных излучений и ядерно-физических методов для модификации и изучения наноструктур (эндофуллеренов, дифталоцианинов и пиролизатов этих соединений) перспективных для приложений в ядерной энергетике, задачах фотокатализа и биомедицины. Разработаны методы синтеза, хроматографической очистки и разделения фуллеренов (C_{60} , C_{70} , высших гомологов) и эндофуллеренов с лантаноидами, $Ln@C_{2n}$ ($n \geq 30$), способы перевода этих структур в водорастворимую форму при гидроксилровании с образованием фуллеренолов [1,2]. В этих структурах содержание ионов Ln^{3+} , формирующих эндоздральные комплексы с фуллеренами, определялось рентген-флуоресцентным методом [3]. С помощью нейтронного и синхротронного рассеяния изучено упорядочение фуллеренолов $Ln@C_{2n}(OH)_x$ ($n \geq 30$, $x \sim 30$) в водных средах в результате молекулярных взаимодействий через магнитные моменты инкапсулированных атомов и электрические дипольные моменты молекул, их гидрофобные взаимодействия при вариации температуры и pH. Определены радиусы молекулярных корреляций и фрактальные размерности агрегатов фуллеренолов (цепных и разветвленных, глобулярных) на масштабах $\sim 10^0$ - 10^2 нм в связи с задачами биомедицинских применений данных объектов в магнитно-резонансной томографии и фотодинамической терапии (контрастирующие агенты, фотосенсибилизаторы) [4]. Другого типа соединения, дифталоцианины в виде плоских лигандов, связанных через атом лантаноида, синтезировали и подвергали пиролизу (вакуум, атмосфера Ar, 800-1600 °C), чтобы изолировать атомы металла в ультрапористых матрицах углерода в целях разработки стойких к радиационным и тепловым воздействиям, климатическим факторам наноконтейнеров радионуклидов, заключаемых в прочные углеродные ячейки размером порядка нанометра по данным рассеяния нейтронов и рентгеновского излучения [5,6]. Приведенные примеры показывают возможности ядерно-физических методов для развития направленного синтеза функциональных металло-углеродных наноструктур.

Библиографические ссылки

1. Козлов В.С., Суясова М.В., Лебедев В.Т. / Журнал прикладной химии. 2014. Т. 87. № 2. С.137-143.
2. Седов В.П. [и др.] / Патент РФ, Ru 2659972 C1. Рег.: 04.07.2018. Бюл. №19. С.1-10.
3. Zinovyev V. G. et al. / Евразийский Союз Ученых. 2019. Vol.8. P.40-44.
4. Suyasova M.V. et al. / Applied Magnetic Resonance. 2019. Vol.50. P.1163-1175.
5. Байрамуков В. Ю. [и др.] / Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. 2019. №9. С.10-19.
6. Лебедев В. Т. [и др.] / Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. 2017. №1. С.25-35.

ЭФФЕКТ ЛАНТАНОИДНОГО СЖАТИЯ ЭНДОЭДРАЛЬНЫХ АТОМОВ В МЕТАЛЛОФУЛЛЕРЕНАХ

аРемизов М.В., аЛебедев В.Т.

*^а Петербургский институт ядерной физики им. Б.П.Константинова, НИЦ
«Курчатовский институт», Гатчина, Россия*

Методом малоуглового рассеяния нейтронов в условиях нейтральности и слабой кислотности окружающей среды изучены водные растворы эндофуллеренолов (20; 37 °C) с атомами лантаноидов $\text{Ln}@\text{C}_{82}(\text{OH})_x$ ($x \sim 30$) ($\text{Ln} = \text{Pr}, \text{Sm}, \text{Eu}, \text{Gd}, \text{Tb}, \text{Dy}, \text{Ho}, \text{Tm}$), чтобы установить закономерности самосборки молекул в наноразмерные фрактальные структуры в результате взаимодействий через электрические и магнитные дипольные моменты в зависимости от атомного номера ($Z = 59-69$) инкапсулированных атомов по мере уменьшения их размеров и снижения электроотрицательности.

На первичном уровне образования молекулярных сборок из молекул с ближайшим окружением в пределах первой координационной сферы наблюдаемые эффекты кластеризации были интерпретированы с учетом общих физико-химических и структурных свойств фуллеренолов (особенностей локализации атомов металла внутри углеродных оболочек, степени переноса заряда на них и валентности инкапсулированного атома) [1].

Структурное моделирование, основанное на данных рассеяния нейтронов, позволило установить наличие различных глобулярных и цепных фрактальных форм молекулярной сборки эндофуллеренолов на масштабах от диаметра молекулы до размеров на два порядка выше молекулярного диаметра.

Раскрытые закономерности структурирования эндофуллеренолов в водных средах в зависимости от атомного номера инкапсулированного элемента важны для перспективных актуальных применений магнитных и люминесцентных эндофуллеренолов в тераностике в качестве контрастирующих агентов и фотосенсибилизаторов в магнитно-резонансной томографии и фотодинамической терапии [1,2].

Внедрение эндофуллеренолов в фотодинамическую терапию представляется особенно привлекательным при использовании рентгеновских лучей. Они сильно поглощаются и рассеиваются тяжелыми атомами внутри фуллеренолов, эмитирующих вторичное световое излучение, для возбуждения фуллереновых клеток, либо других связанных с ними фотосенсибилизаторов, что позволяет рассчитывать на достижение высоких фотодинамических эффектов [3].

Библиографические ссылки

1. Cherepanov V. M. et al. / Crystallography Reports. 2020. Vol. 65. P. 404–408.
2. Lebedev V. T. et al. / Soft Materials. 2021.
3. Lebedev V. T. et al. / Springer. 2022. Cham. Ch. 7. P. 179–208.

**УГЛЕРОДНЫЕ НАНОМАТЕРИАЛЫ ГАММА-РЕЗОНАНСНАЯ
СПЕКТРОСКОПИЯ В ПИЯФ НИЦ «КУРЧАТОВСКИЙ ИНСТИТУТ»:
СОСТОЯНИЕ И ПЕРСПЕКТИВЫ СОЗДАНИЯ
IN-BEAM СПЕКТРОМЕТРА НА РЕАКТОРЕ ПИК**

Ремизов М.В., Козлов В.С., Богмут Д.И., Лебедев В.Т.

Петербургский институт ядерной физики им. Б.П.Константинова, НИЦ «Курчатовский институт», Гатчина, Россия

Представлена созданная в НИЦ КИ ПИЯФ физическая модель in-beam спектрометра для реактора ПИК. Рассмотрена методология и характеристики действующего спектрометра электродинамического типа для исследований конденсированных сред (сталей, сплавов, минералов, биологических объектов, металлофуллеренов, наноалмазов, нанотрубок и графенов, включающих атомы Fe, Eu, Dy).

Расширение возможностей гамма-резонансной спектроскопии планируется на реакторе ПИК при постановке полномасштабного прибора на наклонный нейтронный канал. В качестве прототипа такого прибора рассматривается гамма-резонансный спектрометр Будапештского Нейтронного Центра (BNC) [1] с возможностями возбуждения в нейтронном пучке различных ядер с мгновенным гамма-излучением (^{40}K , ^{56}Fe , ^{66}Zn , Gd, Er, Dy, Yb, Hf, W), работы с постоянно активизируемыми ядрами (^{153}Er , ^{166}Er , ^{175}Lu , ^{186}Os , $^{191,192}\text{Ir}$, ^{195}Pt и ^{197}Au) и активированными ядрами с длительным периодом полураспада при проведении экспериментов на остановленном реакторе (^{141}Pr , ^{127}I , ^{129}I , ^{181}Ta , ^{182}W).

Модельный спектрометр, в зависимости от используемого гамма-источника, служит для трансмиссионных и эмиссионных измерений на образцах с металлами (Fe, Eu, Dy) при охлаждении от комнатной температуры до температуры жидкого азота и позволяет тестировать кристаллические и аморфные материалы, наноструктуры (эндофуллерены, нанотрубки, графены), определять валентные и координационные состояния ионов металлов, характер их химической связи, магнитную структуру, координацию атомов относительно окружения, особенности строения окружения иона в ближайших координационных сферах.

Примером недавно полученных результатов служат данные по магнитным нанокompозитам [2] оксида графена (GrO) с частицами магнетита (Fe_3O_4) и содержащего кобальт и железо феррита (CoFe_2O_4) [3]. Исследованы также графены, интеркалированные атомами железа, детонационные алмазы с привитыми ионами Eu [2-4].

Библиографические ссылки

1. Belgya T., Lázár K. / Springer Science + Business Media B.V. 2006.
2. Камзин А.С. [и др.] / Физика твердого тела. 2021. Т. 63. С. 807–816.
3. Камзин А.С. [и др.] / Физика твердого тела. 2021. Т. 63. С. 900–910.
4. Kulvelis Yu. et al. / J. of Surface Investigation: X-ray, Synchrotron and Neutron Techniques. 2020. Vol. 14, Suppl. 1. P. S132–S133.

МОДЕЛИРОВАНИЕ ОПТОАКУСТИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ В СИСТЕМАХ С УГЛЕРОДНЫМИ НАНОСТРУКТУРАМИ

^aРоманов О.Г., ^{a,b}Тимошенко И.А.

^a *Белорусский государственный университет, Минск, Беларусь*

^b *НИИУ «Институт ядерных проблем» БГУ, Минск, Беларусь*

В последнее время оптоакустические процессы, возникающие при облучении различных наночастиц короткими лазерными импульсами, притягивают к себе все возрастающее внимание ввиду развития, например, технологий оптоакустической визуализации. Более того, наночастицы – оптоакустические агенты – рассматриваются и с точки зрения тераностики – новейшего подхода, который сочетает в себе как визуализацию (диагностику), так и терапию, уменьшая степень хирургического вмешательства в организм человека и его негативные последствия.

Поглощение света наночастицами, внедренными в биологическую среду, вызывает ее нагрев и деформацию. В зависимости от преобладающего механизма можно выявить три сценария: оптотермический эффект или гипертермия, оптотермоакустический и оптоакустический эффекты. Оптотермический эффект наблюдается, когда большая часть поглощенной энергии переходит в тепло, что приводит к значительному (десятки Кельвинов) повышению локальной температуры. Это происходит при облучении образца непрерывным излучением в течение значительного времени (секунды или минуты) или лазерным импульсом, длительность которого превышает время распространения акустической волны в наночастице. Оптотермоакустические и оптоакустические эффекты возникают при облучении наночастиц короткими и ультракороткими лазерными импульсами. При этом акустические волны, генерируемые за счет теплового расширения наночастиц, можно использовать не только для оптоакустической визуализации, но и для механического разрушения опухолевых клеток [1].

Изначально в качестве оптоакустических агентов рассматривались металлические и полупроводниковые частицы. Но уникальные свойства углеродных наноматериалов, в том числе оптические, тепловые, механические, электронный транспорт, люминесценция, обеспечили необходимый прорыв для быстрого распространения углеродных наноматериалов в тераностике [2].

В данной работе проводится численное моделирование процессов возбуждения и распространения акустических импульсов в углеродных микро- и наноструктурах при воздействии сверхкоротких лазерных импульсов. Предлагаемая методика численного моделирования основана на решении уравнений движения сплошных сред в форме Лагранжа для пространственно неоднородной среды [3]. Данная модель позволяет рассчитывать поля температуры, давления, плотности и скорости среды в зависимости от параметров лазерных импульсов и характеристик микро- и наноструктур. Исследуются возможности применения различных оптоакустических агентов для целей тераностики.

Библиографические ссылки

1. Golubewa L. et. al. / Sci. Rep. 2020. Vol. 10. P. 22174.
2. Augustine S. et. al. / Biomater. Sci. 2017. Vol. 5. P. 901.
3. Romanov O.G. et. al./ J. Eng. Phys. Thermophysics. 2011. Vol 84. P. 772.

ГИБКИЕ ЭКРАНЫ ТЕРАГЕРЦОВОГО ИЗЛУЧЕНИЯ НА ОСНОВЕ МАССИВОВ УГЛЕРОДНЫХ НАНОТРУБОК

**^aСедельникова О.В., ^aГородецкий Д.В., ^aВолынец Н.И., ^bПоддубская О.Г.,
^bМаксименко С.А., ^bБулушева Л.Г., ^aОкотруб А.В.**

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

^bНИИУ «Институт ядерных проблем» БГУ, Минск, Беларусь

Массивы многослойных углеродных нанотрубок (МУНТ) можно использовать для разработки материала, идеально блокирующего высокочастотное электромагнитное излучение. Высокая эффективность экранирования массивов МУНТ обусловлена собственными свойствами нанотрубок и пористой структурой массива. Пропитка массивов МУНТ полидиметилсилоксаном (ПДМС) позволяет получить тонкий гибкий экран с терагерцовой (ТГц) прозрачностью, обратимо изменяемой посредством механической нагрузки.

Мы исследовали ТГц свойства массивов МУНТ и азотсодержащих МУНТ (N-МУНТ). Массивы были синтезированы на кремниевых подложках методом осаждения химических паров из газовой фазы, затем пропитывались ПДМС («Sylgard 184»). Спектры пропускания регистрировались с помощью терагерцового спектрометра Expla T-Spec. Материалы на основе МУНТ и N-МУНТ демонстрируют разную дисперсию коэффициента прохождения и разные упругие свойства. Моделирование электромагнитных свойств позволило предположить важную роль тонкого слоя из слабо ориентированных МУНТ, присутствующих на поверхности массива, во взаимодействии с падающей ТГц волной. Пропитанный массив МУНТ при растяжении сжимался, что является типичным поведением для резин, в то время как толщина материала на основе N-МУНТ практически не изменялась при растяжении. Расчеты DFT показали, что дефекты азота выступают в качестве связующих «якорей» для цепей ПДМС, препятствуя скольжению УНТ при растяжении. Результаты исследований показали, что покрытия на основе N-МУНТ демонстрируют лучшую экранирующую способность по сравнению с МУНТ. В частности, мы обнаружили близкий уровень коэффициента пропускания в терагерцовом диапазоне (менее 2% в диапазоне 400 ГГц) для массивов МУНТ толщиной 300 мкм и N-МУНТ толщиной 100 мкм. Такое поведение объяснялось уплотнением массива и усиленным межтрубным туннелированием в N-МУНТ. Растяжение позволяет обратимо варьировать прозрачность пропитанных массивов.

ПЕРЕСТРОЙКА ПОВЕРХНОСТЕЙ МОНОКРИСТАЛЛА АЛМАЗА ПОД ПЛЕНКОЙ МОЛИБДЕНА В РЕЗУЛЬТАТЕ НАГРЕВА В ВЫСОКОМ ВАКУУМЕ

Седельникова О.В., Окотруб А.В., Городецкий Д.В., Асанов И.П., Федоренко А., Гурова О.А.

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

Благодаря рекордно высокой теплопроводности, высокому напряжению пробоя и радиационной стойкости, алмаз выгодно выделяется среди широкозонных полупроводников в качестве альтернативы кремнию для применений в вычислительной и силовой электронике. Среди углеродных компаньонов к алмазу ярко смотрится графен. Объединение алмаза и графена позволяет получить новый материал, который кроме преимуществ каждого из компонентов будет иметь низкобарьерный электрический и тепловой интерфейс.

В данной работе изучена перестройка поверхности граней {100} и {111} монокристаллического алмаза в результате отжига под пленкой молибдена. Для нанесения металлической плёнки использовался метод магнетронного напыления. Исследование методом атомно-силовой микроскопии в полуконтактном режиме (микроскоп Solver-Pro) показало, что напыление металла делает поверхность более шероховатой. Образцы нагревались в высоком вакууме (10^{-10} мбар) в камере лабораторного спектрометра SPECS FlexPS. После 20 минут отжига при заданной температуре (500 или 800°C) были измерены рентгеновские фотоэлектронные спектры углерода (C1s) и молибдена (Mo3d) без вынесения из зоны высокого вакуума. Показано восстановление оксида молибдена до металлического молибдена после отжига при 500°C и образование карбида молибдена. Нагревание до 800°C приводит к образованию графитопобных слоев на поверхностях грани алмаза {100} и молибденовых частиц, образованных при растрескивании нанесенной металлической пленки в результате отжига. Для алмазной грани {111} найдено формирование графитопобных слоев под пленкой молибдена.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 22-72-10097, <https://rscf.ru/project/22-72-10097/>

КОВАЛЕНТНАЯ И НЕКОВАЛЕНТНАЯ МОДИФИКАЦИЯ УГЛЕРОДНЫХ НАНОТРУБОК ДЛЯ СЕНСОРНЫХ ПРИЛОЖЕНИЙ

Сысоев В.И., Гурова О.А., Лаврухина С.А., Булушева Л.Г., Окотруб А.В.

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

Определение токсичных паров и газов атмосфере требуют высокой чувствительности, быстрого отклика/регенерации при комнатной температуре, а также высокой селективности. Кроме того, немаловажным фактором является дешевизна и простота технологического процесса производства для их практического применения [1]. Применение немодифицированных углеродных нанотрубок (УНТ) в качестве газовых сенсоров хорошо изучено в литературе. Однокомпонентные сенсоры на основе УНТ как правило показывают невысокую селективность, а также относительно высокие рабочие температуры (150-300°C) [2,3]. По этой причине большинство исследований сосредоточено на химической модификации и создании гибридных материалов на основе УНТ с полимерами, металлами и оксидами металлов.

В настоящей работе предлагается создание резистивных газовых сенсоров, основанных на эффекте переноса заряда между УНТ и электрон-донорными (аммиак, вода) и электрон-акцепторными (диоксид азота) молекулами. Для увеличения сенсорного отклика использованы ковалентная и нековалентная модификация поверхности УНТ. Ковалентное присоединения фтор-, кислород- и азотсодержащих групп позволяет достичь модификации их электронной структуры и изменить энергию взаимодействия адсорбент-адсорбат в зависимости от природы функциональной группы. Показано, что фторированные УНТ являются перспективной платформой для создания чувствительного материала. Было проведено изучение механизма сенсорного отклика, включающее в себя изучение кинетики и термодинамики адсорбции молекул на модифицированных УНТ. Нековалентная модификация позволяет увеличить перенос заряда в системе. В качестве второго компонента гибридного материала использовали органические доноры (тетратиафульвален (ТТФ)) и акцепторы (тетрацианохинодиметан (TCNQ)), которые изменяют характер и увеличивают величину сенсорного отклика на акцепторные и донорные молекулы, соответственно.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ №21-73-00229.

Библиографические ссылки

1. Jian Y. et. al. / Nano-Micro Lett. 2020. Vol. 12. 71 p.
2. Valentini L. et. al. / Appl. Phys. Lett. 2003. Vol. 82. P. 961–963.
3. Wongwiriyan W. et. al. / Jpn. J. Appl. Phys. 2005. Vol. 44. P. 482–484.

УЛЬТРАТОНКИЙ ЭЛЕКТРОННО-БЛОКИРУЮЩИЙ ОКСИД АЛЮМИНИЯ ДЛЯ ИК СВЕТОДИОДА НА КОЛЛОИДНЫХ КВАНТОВЫХ ТОЧКАХ PbS

Туровец У.Е., Позняк А.А., Голосов Д.А., Тумилович А.А., Плиговка А.Н.

*Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники,
Минск, Беларусь*

Актуальной проблемой современных тонкопленочных ИК светодиодов является неравновесный транспорт носителей заряда в активную область. Эффективная рекомбинация происходит при сопоставимой концентрации электронов и дырок. Такое условие может быть достигнуто путем введения специального блокирующего или инжектирующего слоя [1]. В качестве эффективного электронно-блокирующего слоя (ЭБС) может быть использован ультратонкий слой оксида алюминия (ОА) [2]. Однако влияние толщины такого слоя на эффективность ИК светодиода ранее не было исследовано.

В данной работе методом атомно-слоевого осаждения (АСО) были сформированы ЭБС различной толщины и исследовано их влияние на яркость, внешнюю квантовую эффективность (ВКЭ) и временную стабильность ИК светодиода.

Методом АСО (ALD Thin Film Deposition System from Kurt J. Lesker Company) в тестовых структурах ИК светодиода на коллоидных квантовых точках (ККТ) PbS были сформированы два ЭБС ОА толщиной 1,5 и 3 нм. В качестве контрольной группы использовали структуру без ЭБС. Температура поверхности составляла 100°C, в качестве источника алюминия использовался триметилалюминий, а в качестве источника кислорода – вода. Толщина слоя определялась по количеству циклов и известной скорости осаждения, которая составляла $\sim 1 \text{ \AA} \cdot \text{цикл}^{-1}$.

Структура тестового ИК светодиода представляла собой следующую последовательность слоев: стеклянная подложка с ITO 70–80 нм, оксид цинка 25–30 нм, ЭБС ОА 1,5 или 3 нм, слой ККТ PbS $\sim 47,5$ нм, органический полимер 4,4'-бис(карбазол-9-ил) бифенил 60 нм, оксид молибдена 3 нм и электрод из золота 100 нм.

В структуре без ЭБС максимальная яркость составляла $2,14 \text{ Вт} \cdot \text{м}^{-2} \cdot \text{ср}^{-1}$, а максимальное значение ВКЭ – 0,1%. Во всех трех структурах пик электролюминесценции находился на длине волны 1300 нм, что соответствует ближнему ИК диапазону. Анализ структур с ЭБС показал значительное улучшение характеристик ИК светодиода. Максимальная яркость структуры была достигнута при использовании ЭБС толщиной 1,5 нм и составила $7,42 \text{ Вт} \cdot \text{м}^{-2} \cdot \text{ср}^{-1}$, структура с ЭБС ОА 3 нм показала величину яркости $4,5 \text{ Вт} \cdot \text{м}^{-2} \cdot \text{ср}^{-1}$. Для ЭБС 1,5 и 3 нм максимальное значение ВКЭ-характеристики не показало значительного улучшения и составляла $\sim 0,2\%$. ИК светодиод с ЭБС 1,5 и 3 нм оставался стабильным более 144 часов при отклонении пиковой яркости не более чем на 10%.

Таким образом, экспериментально полученные результаты показывают, что использование ЭБС ОА позволяет увеличить яркость устройства до $7,42 \text{ Вт} \cdot \text{м}^{-2} \cdot \text{ср}^{-1}$ без ухудшения ВКЭ и временной стабильности. Дальнейшие исследования по повышению эффективности ИК светодиодов на ККТ PbS путем введения в конструкцию ЭБС приближают возможность их коммерциализации. Применение таких светодиодов позволило бы найти, экономичную замену твердотельным ИК светодиодам в приборных приложениях устройств ночного видения и волоконно-оптической связи.

Библиографические ссылки

1. Cao W. et. al. / Nat. Comm. 2018. Vol. 9. P. 2608.
2. Marus M. et. al. / Appl. Phys. Lett. 2020. Vol.116 (19). P. 191103-1–191103-6.

СИНТЕЗ И МЕХАНИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА МЕТАЛ-УГЛЕРОДНЫХ КОМПОЗИТОВ

Углов В.В.

Белорусский государственный университет, Минск, Беларусь

Аморфный гидрированный (гидрогенизированный) углерод $a\text{-C:H}$ является материалом, обладающим такими уникальными свойствами как оптическая прозрачность в видимом и ИК диапазонах, химическая и радиационная стойкость, высокое электрическое сопротивление и износоустойчивость. Указанные характеристики материала проявляются благодаря особенностям строения его структуры, содержащей наноразмерные блоки (нанокластеры) двух основных аллотропных модификаций углерода-графита и алмаза. Вводя в материал легирующие добавки, можно существенным образом модифицировать наноструктуру и тем самым варьировать электрофизические и спектральные свойства $a\text{-C:H}$.

Методом совмещения плазмо-усиленного химического вакуумного осаждения углеродной составляющей из газовой смеси Ar-CH_4 , $\text{Ar-C}_2\text{H}_2$ и физического распыления металлической (Cu , Ni) мишени сформированы металл-углеродные композиты. Методом Резерфордского обратного рассеяния выявлены особенности изменения содержания углерода в зависимости от металлической составляющей. Показано, что одновременное использование Ar-CH_4 газовой смеси и медной мишени даёт возможность формировать медно-углеродные нанокompозиты, изменение углерода в которых происходит нелинейным образом. В случае исследования элементного состава никель-углеродных (Ni/a-C:H) композитов имеет место линейная закономерность изменения концентрации углерода и никеля в зависимости от содержания CH_4 и C_2H_2 в смеси реакционных газов.

Методом просвечивающей электронной микроскопии установлена закономерность изменения структуры, заключающаяся в трансформации столбчатой структуры с латеральным размером 30 нм в аморфную при увеличении концентрации углерода выше 35 ат.%, что согласуется с размерами кристаллитов карбида никеля Ni_3C , определенных из рентгеновских дифракционных спектров и картин микродифракции.

Установлена особенность структурно-фазового состояния медно-углеродных Cu/a-C:H нанокompозитов, заключающаяся в формировании сферических включений меди со средним размером 10 нм, внедрённых в аморфную углеродную матрицу. Предложена кинетическая модель формирования наночастиц меди в плазменном магнетронном реакторе, учитывающая как диффузионные процессы, так и испарение атомов с поверхности частицы, которая позволяет определить средний размер медных кластеров, образующихся в результате реакций синтеза в плазме.

Показано, что при формировании в $\text{Ar-C}_2\text{H}_2$ газовой смеси медно-углеродных композитов с концентрацией углерода до 30 ат. % происходит осаждение композитных пленок с мягкой полимероподобной $a\text{-C:H}$ матрицей, имеющей твёрдость 2,5 ГПа. Установлено, что в интервале концентрации углерода от 30 до 70 ат. % происходит переход к осаждению композитных пленок с более твёрдой матрицей. При этом увеличение нанотвёрдости плёнок составляет более 2 раз, что вызвано структурными изменениями и ростом внутренних механических напряжений в композитной плёнке.

Выявлены оптимальные концентрации углерода, обеспечивающие наилучшие эксплуатационные характеристики металл (Cu,Ni)-углеродных композитов. Показано, что максимальная износостойкость наблюдается для плёнок с концентрацией углерода 20-30 ат.%, при этом начальный коэффициент трения плёнок уменьшается в 1,5 раза, а износостойкость увеличивается более чем в 2 раза.

ДИАГНОСТИКА БРОМИРОВАННЫХ УГЛЕРОДНЫХ НАНОМАТЕРИАЛОВ И ИХ МАГНИТНЫЕ И ЭЛЕКТРОХИМИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА

**Федосеева Ю.В., Шляхова Е.В., Ворфоломеева А.А., Гребёнкина М.А.,
Булусева Л.Г., Окотруб А.В.**

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

В настоящее время активно разрабатываются методы синтеза и химической функционализации углеродных наноструктур для получения материалов с новыми функциональными свойствами. Однако сравнительно мало внимания посвящено модификации углеродных образцов галогенами для улучшения их электрохимических и магнитных применений. В данной работе был разработан метод синтеза пористых азотсодержащих углеродных материалов методом химического осаждения из газовой фазы с использованием паров ацетонитрила и карбоновых солей кальция. Образцы характеризуются иерархической пористой структурой с высоким содержанием мезопор размером 1-30 нм, объемом пор около $1 \text{ см}^3 \text{ г}^{-1}$, большой удельной площадью поверхности около $400\text{--}800 \text{ м}^2 \text{ г}^{-1}$. Было обнаружено около 4 ат% азота в образцах в трех химических состояниях. Бромирование полученных образцов проводилось при комнатной температуре в насыщенных парах молекулярного брома. Исследование морфологии, состава, особенностей структуры и электронного строения бромированных образцов осуществлялось методами электронной микроскопии, спектроскопии комбинационного рассеяния света, инфракрасной спектроскопии, рентгеновской дифракции, рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии и ближней тонкой структуры рентгеновского поглощения. Было обнаружено, что общая концентрация брома в образцах составляет 2–3 ат%. Атомы брома находятся в двух основных состояниях: ковалентно связанный с углеродом на краях графеновых фрагментов и молекулярный бром хемосорбированный в межслоевом пространстве и порах. Соотношением двух состояний брома можно управлять, меняя количество дефектов и кислород-содержащих групп в образцах. Было проведено тестирование бромированных азотсодержащих углеродных образцов в качестве анодных материалов в литий- (ЛИА) и натрий-ионных аккумуляторах (НИА) в конфигурации полужеек с металлическими литиевыми и натриевыми противоэлектродами. Установлено, что емкость исходных образцов в НИА составляет $100\text{--}137 \text{ мА} \cdot \text{ч} \cdot \text{г}^{-1}$ при плотности тока $1 \text{ А} \cdot \text{г}^{-1}$ и $160\text{--}205 \text{ мА} \cdot \text{ч} \cdot \text{г}^{-1}$ при $0.05 \text{ А} \cdot \text{г}^{-1}$, а в ЛИА – $165\text{--}230 \text{ мА} \cdot \text{ч} \cdot \text{г}^{-1}$ при $1 \text{ А} \cdot \text{г}^{-1}$ и $338\text{--}500 \text{ мА} \cdot \text{ч} \cdot \text{г}^{-1}$ при $0.05 \text{ А} \cdot \text{г}^{-1}$. Емкость бромированных образцов существенно превышает значения емкости, полученные для исходных образцов, а также емкость графита. В НИА емкость составляет $148\text{--}216 \text{ мА} \cdot \text{ч} \cdot \text{г}^{-1}$ при $1 \text{ А} \cdot \text{г}^{-1}$ и $254\text{--}330 \text{ мА} \cdot \text{ч} \cdot \text{г}^{-1}$ при $0.05 \text{ А} \cdot \text{г}^{-1}$, а в ЛИА – $320\text{--}450 \text{ мА} \cdot \text{ч} \cdot \text{г}^{-1}$ при $1 \text{ А} \cdot \text{г}^{-1}$ и $572\text{--}845 \text{ мА} \cdot \text{ч} \cdot \text{г}^{-1}$ при $0.05 \text{ А} \cdot \text{г}^{-1}$. Увеличение емкости бромированных электродных материалов было связано с улучшенной адсорбцией ионов щелочных металлов вблизи центров локализации брома, что подтверждается анализом циклических вольтамперограмм и результатами квантово-химических расчетов. Было рассмотрено влияние бромирования графитоподобных материалов их магнитные свойства. Обнаружено, что бромирование привело к увеличению концентрации парамагнитных центров, вызванных наличием атомов углерода с ненасыщенными связями или наличия ионов $\text{Br}^\cdot$.

Работа была выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проект № 19-73-10068).

ВЛИЯНИЕ УЛЬТРАЗВУКОВОЙ ОБРАБОТКИ НА ДИЭЛЕКТРИЧЕСКУЮ ПРОНИЦАЕМОСТЬ КОМПОЗИТОВ С УГЛЕРОДНЫМИ НАНОТРУБКАМИ

^аЧервинская А.С., ^{а,б}Доценко О.А., ^аБеломытцева Е.С., ^сКачусова А.О.

^аНациональный исследовательский Томский государственный университет, Томск, Россия

^бТомский государственный университет систем управления и радиоэлектроники, Томск, Россия

^сРоссийский Федеральный ядерный центр Всероссийский научно-исследовательский институт экспериментальной физики, Саров, Россия

В данной работе представлены результаты влияния ультразвуковой обработки (УЗО) на диэлектрическую проницаемость (ДП) композиционного материала, в качестве связующего в котором используется вододисперсионная краска. При таком способе обработки жидкости возникает ультразвуковая кавитация – возникновение пульсирующих и захлопывающихся пузырьков, что может влиять на процессы получения экспериментальных образцов.

В работе [1] предположили, что кавитационные пузырьки, образующиеся на открытом конце капиллярной трубки, способствуют накоплению давления внутри трубки, приводящего к повышению высоты жидкости в ней. Напротив, Розина и др. [2] предположили, что явления кавитации (ударные волны и высокие скорости кумулятивных струй) не были решающим фактором для формирования потока жидкости, проникающего через микрокапиллярные каналы. Поэтому роль кавитации и динамики кавитационного пузыря остается открытой темой для дальнейшего изучения.

В ходе выполнения данного исследования были изготовлены образцы из краски и многостенных углеродных нанотрубок (МУНТ) с временем обработки ультразвуком от 0 до 20 минут. При изготовлении образцов использованы: вододисперсионная краска фирмы ЗАО «Декарт» Московская область г. Химки, в составе которой присутствует акрилатная дисперсия; МУНТ диаметром 9,4 нм [3] с концентрацией 0,5 масс. %. При исследовании использовались: резонаторный метод в диапазоне частот от 3 ГГц до 8 ГГц; конденсаторный метод – в диапазоне от 100 кГц до 2 МГц.

Результаты показали, что наличие МУНТ в виде длинных проводящих волокон, переплетенных между собой, увеличивает проводимость композита. С увеличением времени УЗО композита, содержащего 0,5 масс. % МУНТ, удельная проводимость композита увеличивается. Одновременно с увеличением проводимости происходит рост ДП, а при времени обработки, равном 12 минут, наблюдается максимум и ее уменьшение, вызванное тем, что происходит разрушение отдельных МУНТ, и, соответственно, уменьшение их длины и числа контактов. Дальнейшая УЗО равномерно распределяет трубки по композиту и приводит к появлению вторичных контактов и проводящих цепочечных структур, что наблюдается в увеличении ДП композита, начиная с 16 минут обработки.

Из полученных результатов следует, что при одной и той же концентрации МУНТ можно изменять значения ДП композита, проводя УЗО.

Библиографические ссылки

1. Dezhkunov N.V. et. al. / J. Eng. Phys. Thermophys. 2004. Vol. 77. P. 53–61.
2. Dezhkunov N. et. al. / Forum Acousticum. 2005.
3. Kuznetsov V. L. et. al / Phys. Status Solidi B. 2010. № 247. P. 2695 – 2699.

ЧАСТОТНАЯ СТАБИЛИЗАЦИЯ ЛОВ ДЛЯ РЕЗОНАТОРНЫХ ИЗМЕРЕНИЙ ПОЛЯРИЗУЕМОСТИ МАЛЫХ КОМПОНЕНТОВ КОМПОЗИЦИОННЫХ МАТЕРИАЛОВ

Шаншо А., Дорофеев И.О., Дунаевский Г.Е.

Национальный исследовательский Томский государственный университет, Томск, Россия

Разработка композиционных материалов с заданными в широкой полосе частот электромагнитными характеристиками предполагает измерения частотных свойств как отдельных элементов создаваемых композитов, так и сформированного итогового композита.

При этом, если предполагать охват и терагерцовой области электромагнитного спектра, то здесь частотная стабильность ЛОВ-излучателей спектрометров достаточна для исследований спектральных свойств листовых материалов с потерями в полосе до 1,5 ТГц [1], но недостаточна для проведения измерений в этом диапазоне характеристик малых компонентов, поскольку эти измерения требуют применения резонаторных методов и, соответственно, требуют высокой частотной стабильности применяемых генераторов. В частности, дополнительной стабилизации ЛОВ требуют измерения в высокодобротных открытых квазиоптических резонаторах, применение которых для исследования поляризуемости малых тел было обсуждено авторами ранее [2]. Использование для этих целей синтезатора на основе умножения частот, обеспечивающего высокую частотную стабильность, также малоэффективно из-за существенно снижающейся, при многократном умножении частот, мощности такого излучателя.

В связи с этим представляет интерес возможность использования в качестве источника излучения терагерцового спектрометра ЛОВ, но стабилизированной субгармоническим смесителем и цепью ФАПЧ. Для такой стабилизации достаточно использовать ответвление только части мощности, генерируемой ЛОВ, основная мощность лампы может быть использована для измерений.

В качестве примера реализации такой схемы предложена стабилизация субтерагерцовой ЛОВ в диапазоне 55-65 ГГц, достигнуто существенное снижение уровня фазового шума. Ширина линии составила менее 1 Гц и определяется шириной линии излучения низкочастотного генератора опорной частоты. Данная схема стабилизации ЛОВ позволяет фиксировать смещения резонансной частоты открытого резонатора и изменений ее полуширины с разрешением порядка единиц Гц.

Библиографические ссылки

1. Спектрометр терагерцового диапазона СТД-21. <https://reestrinform.ru/reestr-oborudovania-minpromtorg/perechen-oborudovaniia-i-priborov-dlia-himicheskikh-issledovanii/spektrometr-teragertcovogo-diapazona-std-21-oao-kdp-obj24074.html> (последнее обращение 20.10.2022).
2. Dunaevsky G.E., Dorofeev I.O. / Semiconductor nanotechnology: advances in information and energy processing and storage. 2018. P.169–197.

НАНОЧАСТИЦЫ С МНОГОРЕЗОНАНСНЫМ РАССЕЯНИЕМ В ДАЛЬНОМ ИК ДИАПАЗОНЕ

Шуба М.В.

НИИУ «Институт ядерных проблем» БГУ, Минск, Беларусь

В настоящее время большой интерес вызывает локализованный плазмонный резонанс в металлических наночастицах. На частоте резонанса происходит локализация энергии оптического излучения вблизи наночастицы, сопровождающаяся увеличением ее сечения поглощения и сечения рассеяния, а также эффектом усиления поля в ближней зоне. Частота резонанса зависит от размеров наночастицы. В металлических нанопроволоках имеет место возбуждение стоячей поверхностной волны. На частотах, для которой длина нанопроволоки кратна нечетному числу длин полуволн $L=n\lambda/2$ ($n = 1,3,5..;$ λ – длина поверхностной волны), возникают локализованные поверхностные резонансы, называемые также геометрическими резонансами. Наиболее интенсивным является первый ($n=1$) геометрический резонанс. Интенсивность резонансов высших порядков существенно ниже, и поэтому они представляют значительно меньший интерес с точки зрения применений.

В настоящей работе показана возможность создания многорезонансной наночастицы с примерно одинаковой интенсивностью рассеяния и поглощения на нескольких резонансах в дальней инфракрасной области частот. Такая частица состоит из двух элементов, первому из них присуще высокое замедление волн, а второму – низкое. Первым элементом может выступать углеродная нанотрубка, а вторым – частично покрывающая ее металлическая оболочка. В нанотрубке возникают геометрические резонансы высших порядков [1], провоцируя поляризацию металлической оболочки. Отклик от такой гибридной наночастицы является многорезонансным, причем интенсивность резонансов сравнима по величине. Характерный продольный размер многорезонансной частицы много меньше длины волны падающего излучения. При этом, в зависимости от размеров частицы частотный диапазон, в котором реализуются резонансы, может лежать в терагерцовой, средней и дальней инфракрасных спектральных областях.

Результаты работы могут найти применение при разработке многорезонансных антенн инфракрасного и терагерцового частотных диапазонов.

Библиографические ссылки

1. Slepyan G. Ya. et al. / Phys. Rev. B. 2006. Vol. 73. P. 195416

ПОЛУЧЕНИЕ ГРАНУЛИРОВАННЫХ ПЛЕНОК $\text{Sr}_2\text{FeMoO}_6$ И ИХ МАГНИТНЫЕ СВОЙСТВА

Ярмолич М.В., Каланда Н.А., Петров А.В.

ГО «НПЦ НАН Беларуси по материаловедению», Минск, Беларусь

Получение пленок $\text{Sr}_2\text{FeMoO}_6$ (SFMO) с контролируемыми магниторезистивными и магнитными характеристиками сопряжено с рядом трудностей методического характера, определяемые условиями формирования пленки [1]. Для достижения этих целей необходимо совершенствовать способы синтеза пленок SFMO. Все большее внимание исследователей привлекает получение пленок методом центрифугирования, ввиду простоты его исполнения.

Для формирования пленки на поликоровой подложке методом центрифугирования был синтезирован однофазный наноразмерный порошок SFMO модифицированным цитрат-гель методом, средний размер зерен которого после ультразвуковой диспергации составил около 69,3 нм [2, 3].

Для приготовления суспензии с целью получения пленок ферромолибдата стронция методом центрифугирования использовался полимер – PVP (Polyvinylpyrrolidone). В качестве растворителя для полимера рассматривались дистиллированная вода, хлороформ и этанол. Последний был выбран ввиду чувствительности SFMO к воде и высокой токсичности хлороформа. Вязкость суспензии оптимизировалась экспериментально, путем изменения концентраций полимера, растворителя и порошка. После полного растворения полимера суспензия подвергалась ультразвуковой диспергации в течение 60 минут при мощности $P = 0,75P_n$. Далее, капля полученной суспензии наносилась в центр неподвижной подложки. Затем подложка начинала вращаться с высокой угловой скоростью, в результате чего под действием центробежной силы капля растекалась по поверхности. Для предотвращения образования трещин использовалось многократное нанесение суспензии. Микроструктура и толщина пленок, полученных таким методом, зависят от состава, однородности и вязкости суспензии, скорости вращения подложки при нанесении суспензии. Обнаружено, что на малых скоростях центрифугирования слой полученной пленки неоднороден по толщине. Микроструктура пленок, нанесенных при скорости вращения подложки $v_{\text{вр}}=4500$ об/мин, характеризуется увеличившейся однородностью по сравнению с пленками, нанесенными при $v_{\text{вр}}=2500$ и 3500 об/мин. Дополнительный отжиг пленок, нанесенных при скорости вращения подложки 4500 об/мин при 1220 К в течение 1 часа в потоке газовой смеси $5\%\text{H}_2/\text{Ar}$ приводит к исключению вторичных фаз и уменьшению концентрации антиструктурных дефектов типа Fe_{Mo} и Mo_{Fe} .

При измерении полевых зависимостей намагниченности полученных пленок SFMO при $T=6$ К установлены значения величин насыщения намагниченности $M_{\text{нас}} \sim 2$ мБ/ф.е., которые значительно ниже теоретических ($M_{\text{теор}}=4$ мБ/ф.е.). Это обусловлено наличием антиструктурных дефектов типа Fe_{Mo} и Mo_{Fe} , стимулирующих перераспределение электронной плотности с изменением электронной конфигурации части ионов железа и молибдена.

Работа выполнена при финансовой поддержке проекта БРФФИ № Ф21У-003.

Библиографические ссылки

1. Suchanek G. et. al. / Phys. Stat. Sol. B 2020. Vol. 257 (3). P. 1900312-1–20.
2. Yarmolich M. et. al./ Beilstein J. Nanotechnol. 2016. Vol.7. P. 1202–1207.
3. Kovalev L. et. al./ ACS Appl. Mater. Interfaces. 2014. Vol.6 (21). P. 19201–19206.

PHYSICO-CHEMICAL PROPERTIES EVOLUTION AND INTERNAL CHANNELS OPENING OF SINGLE-WALLED CARBON NANOTUBES UNDER ELECTROCHEMICAL TREATMENT

Bulavskiy M.O., Fedorov F.S, Nasibulin A.G.

Skolkovo Institute of Science and Technology, Moscow, Russia

Investigation of single-walled carbon nanotube (SWCNT) internal cavities opening constitute the great fundamental and applied interest [1]. Extremely high attention to SWCNTs in the scientific community caused, first of all, by the promising applications of SWCNTs as the basis for production of transistors [2], sensors [3] and transparent conductors [4], and as promising material for utilization in supercapacitors [5], alkali-ion batteries [6] and electrocatalytic applications [7]. The capability to use SWCNTs as a material in the majority of such applications is highly dependent on the specific surface area of SWCNT films and then on the accessibility of the internal SWCNT voids. Opening of SWCNT internal voids can be accomplished using electrochemical treatment, initially reported by Holloway *et al.* [8]. However, method described in that work has several drawbacks as ambiguity of cavities opening proof and necessity of preliminary SWCNT filling with inorganic compounds that could significantly affect electrochemical behavior of SWCNTs. Some authors report utilization of filling opened SWCNT cavities with β -carotene for establishment of opening phenomenon [9]. Although this approach supports the successful opening only indirectly and requires sophisticated processes of material preparation for the investigation. Therefore, the line under the investigation of SWCNT voids opening and direct proof is still required.

In this work, we have examined physico-chemical properties evolution and their relation to the internal channels opening of single-walled carbon nanotubes under electrochemical treatment. The investigated material was placed on the polyimide substrate with the opening SWCNT film of 90% transmittance in the middle of visible region (550 nm) comprising chaotically oriented SWCNTs synthesized using floating catalyst (aerosol) chemical vapor deposition (CVD) method [10]. The electrochemical treatment itself consisted in the potential cycling of SWCNT film immersed into the 0.5 mol l⁻¹ sulfuric acid electrolyte for 100 cycles at 20 mV s⁻¹ sweep rate between the bottom limit potential 0.2 V vs. RHE and top limit potential 0.7–1.5 V vs. RHE.

The results of the research revealed optical, electrical properties behavior as well as functional composition and structural changes, which were attributed to the I-V curves. It was established that electrochemical opening of SWCNT internal voids opening starts with the top limit potential 0.9 V vs. RHE. SWCNT films treated at the top-limit potentials not exceeding 1.1 V vs. RHE exhibit the most filling ability. It was claimed that UV-vis-NIR and X-ray photoelectron spectroscopy are more suitable for SWCNT channels opening survey and confirmation.

The authors acknowledge Russian Foundation of Basic Research project no. 20-03-00804. The work was supported by the Council on grants (number HIII-1330.2022.1.3).

References

1. Zhang G. *et. al.* / Science. 2006. Vol. 314. P. 974–977.
2. Wei D. *et. al.* / Adv. Funct. Mater. 2009. Vol. 19. P. 3618–3624.
3. Alwarappan S. *et. al.* / J. Nanosci. Nanotechnol. 2009. Vol. 9. P. 2991–2996.
4. Goldt A. *et. al.* / J. Mater. Chem. C. 2021. Vol. 9. P. 4514–4521.
5. Futaba D. *et. al.* / Nat. Mater. 2006. Vol. 5. P. 987–994.
6. Che G. *et. al.* / Nature. 1998. Vol. 393. P. 346–349.
7. Cao R. *et. al.* / Nat. Commun. 2013. Vol. 4. P. 1–7.
8. Holloway A. *et. al.* / J. Phys. Chem. C. 2008. Vol. 112. P. 10389–10397.
9. Tominaga M. *et. al.* / RSC Adv. 2014. Vol. 4. P. 27224–27227.
10. Tian Y. *et. al.* / Carbon. 2011. Vol. 49. P. 4636–4643.

INTERACTION OF PARTIALLY FLUORINATED GRAPHITE WITH PHOTONS

Bulusheva L.G., Semushkina G.I., Fedoseeva Yu.V., Sysoev V.I., Okotrub A.V.

Nikolaev Institute of Inorganic Chemistry SB RAS, Novosibirsk, Russia

Fluorination of graphite using inorganic fluorides at room temperature produces compounds with a composition CF_x , where x is usually below 0.5. We have prepared a set of CF_x samples with $0.3 < x < 0.5$ by changing the concentration of the fluorinating agent BrF_3 in Br_2 and the duration of its contact with graphite in sealed reactors at room temperature. According to the XPS data, the C–F bonds are covalent regardless of the fluorine content. The fluorinated layers were spaced by acetonitrile, which is transparent in the visible range and therefore does not affect the color and luminescence of the sample. Optical properties were studied on solid samples to exclude their modification during dispersion in a solvent. The optical absorption spectra of CF_x samples showed a band in the UV range (~ 270 nm) and a weaker band in the visible range (~ 380 – 650 nm). The latter band was redshifted with a decrease in the fluorine content. The photoluminescence (PL) spectra of the samples were fitted by the green, green-yellow, orange-red, and red components. The weakest green band and the highest orange-red band were observed in the spectrum of $\text{CF}_{0.33}$. To interpret the experimental spectra, we used time-dependent density functional theory (TDDFT) calculations of polyaromatic and polyene structures in the fluorographene surrounding. It was shown that these sp^2 -carbon regions are mainly responsible for the optical absorption in the ultraviolet and visible regions, respectively. The electron-hole recombination within branched aromatic rings or long carbon chains produces orange-red emission, while green-yellow PL is due to transitions of excited polyene electrons to half-occupied levels of aromatic carbon [1].

Photolysis of CF_x with embedded acetonitrile was studied using the radiation from a synchrotron source, which covers a wide range of photon energies and the UV light. Under exposure to non-monochromatized synchrotron radiation light, CF_x layers lose a part of fluorine and acquire nitrogen atoms from acetonitrile. These atoms are located at the boundaries of vacancies, produced when fluorine atoms are removed from the layer together with carbon. The photolysis of acetonitrile yields N_2 and HCN molecules. The study shows that the products of the photolysis of CH_3CN depend on the time of irradiation and the fluorine loading of the fluorographitic matrix [2]. The kinetics of photodegradation of CF_x samples under UV irradiation was shown to be also dependent on the fluorine content and the nature of guest molecules in the interlayer space. A reversible and reproducible increase (decrease) in the PL intensity was found upon adsorption of acetonitrile (acetone) vapors on the surface of fluorinated layers.

Our results demonstrate the prospect of fluorinated graphite crystallites as anisotropic optical elements. Layers of fluorinated graphite are promising as sensitive elements of optical chemosensors.

References

1. Okotrub A.V. et. al. / Carbon 2022. Vol. 193. P. 98–106.
2. Semushkina G.I. et. al. / Nanomaterials 2022. Vol. 12. P. 231.

COUPLING OF GRAPHENE LAYERS WITH MOLYBDENUM DISULFIDE FOR BOOSTING OF LITHIUM AND SODIUM STORAGE

Bulusheva L.G., Kotsun A.A., Koroteev V.O., Stolyarova S.G, Okotrub A.V.

Nikolaev Institute of Inorganic Chemistry SB RAS, Novosibirsk, Russia

The large interlayer distance in hexagonal MoS₂ (0.62 nm) favors the intercalation of lithium and sodium ions. Intercalates decompose to form molybdenum and alkali metal sulfides, which can dissolved in the electrolyte. As a result, the battery capacity decreases. The combination of MoS₂ with conducting carbon component prevents this undesirable process and also improves the electrical conductivity of the electrode material. We propose a simple approach, based on simultaneous thermal decomposition of the precursors of MoS₂ and graphene in an inert atmosphere, to provide a tight coupling of the components at nanoscale. The mixtures of graphene oxide (GO) and ammonium tetrathiomolybdate, (NH₄)₂MoS₄, are used to obtain few-layer MoS₂ nanocrystals distributed on the graphene surface or between the graphene layers. Under thermal shock conditions some carbon atoms from graphene lattice are removed together with oxygen atoms. Carbon atoms at the boundaries of atomic vacancies interact with sulfur of MoS₂ edges. A firm bonding between graphene and MoS₂ layers was confirmed by electron energy loss spectroscopy (EELS) measurements for graphene areas rarely populated by MoS₂ nanoparticles and completely covered by MoS₂.

The obtained MoS₂/graphene materials were tested in Li-ion and Na-ion batteries using the respective alkali metal sheets as counter electrodes. The best performance in the Li-ion batteries showed the material with a ratio of MoS₂ to carbon of about 4 to 1 by the weight synthesized at 400 °C. At current densities of 0.1, 5, and 10 A g⁻¹, its specific capacity was 1044, 717, and 564 mAh g⁻¹. In Na-ion batteries, materials produced at 600 °C were out of competition. They were able to deliver 445 mAh g⁻¹ at 0.1 A g⁻¹ and 200 mAh g⁻¹ at 10 A g⁻¹, showing a high rate capability. The obtained characteristics are among the best ones currently reported in the literature. This phenomenon is related to the enlarging atomic vacancies in graphene layers, accommodation of several alkali metal atoms around on a Mo atom, and complete extraction of ions from metal sulfides. The last two processes are attributed to anchored and dispersed molybdenum and sulfur species on and between defective graphene layers.

The work was financially supported by the Russian Foundation for Basic Research (Grant. 21-53-12021).

References

1. Koroteev V.O. et. al. / Carbon 2021. Vol. 173. P. 193–204.

THE EFFECT OF BULK DENSITY ON THE PERFORMANCE OF SINGLE-WALLED CARBON NANOTUBE-THERMOSET NANOCOMPOSITES

^a **Butt H.A.**, ^{a,b} Novikov I.V., ^a Krasnikov D.V., ^a Sulimov A.V., ^a Pal A.K., ^a Evlashin S.A.,
^c Vorobei A.M., ^c Zuev Y.I., ^a Ostrizhniy D., ^a Dzhurinskiy D., ^a Popov Y.A.,
^c Parenago O.O., ^{a,b} Nasibulin A.G.

^a Skolkovo Institute of Science and Technology, Moscow, Russia

^b Aalto University School of Chemical Engineering, Espoo, Finland

^c Kurnakov Institute of General and Inorganic Chemistry of RAS, Moscow, Russia

Due to the unique ensemble of structural properties [1], high chemical and thermal stability [2], yet tailorable surface composition and inherent high electrical and thermal conductivities [1-4], carbon nanotubes (CNTs) are the frontline material for the manufacturing of advanced electrically conductive polymer matrix composites (PMCs) [5-7]. Bulk density is one of the rare CNT parameters almost unexplored so far for its effect on PMCs, while the fine-tuning brings interesting features [5, 6].

Here we assess the role of the bulk density of single-walled carbon nanotube (SWCNT) powder on the final electrical and thermal properties of SWCNT/thermoset. Three density states of the same nanotubes were used to determine the effect of pre-manufacturing density on the final nanocomposite properties, while masterbatches were used as a comparative reference for performance. Two procedures were employed to alter the pristine bulk density of the pristine SWCNT powder (18 g/l); supercritical fluid-based dispersion (1.6 g/l) and pneumatic compression (450 g/l). The findings showed that the bulk density showed no significant effect on the electrical ($\sim 10^{-7}$ - 1 S/cm) and thermal (0.210 - 0.304 W/mK) conductivities of the nanocomposites. Unexpectedly, percolation thresholds of altered density powders were close to those of masterbatches (0.001-0.003 wt. %). The study shows that compressed nanotube powder provides electrical and thermal performance close to pristine powder and pre-dispersed masterbatches, while being free from common drawbacks such as the higher price of masterbatches and aerosolization during handling of the powder. This new route offers a cheap, matrix-free, and safe manufacturing solution with equitable final properties for SWCNT/thermoset nanocomposites. We thank the Council on grants of Russian Federation (grant number HIII-1330.2022.1.3) and the Russian Science Foundation (project No. 21-72-20050).

References

1. Dresselhaus M.S. et. al. / Philos Trans A Math Phys Eng Sci. 2004. Vol. 362. P. 2065–2098.
2. Ibrahim K.S. / Carbon letters. 2013. Vol. 14. P.131–144.
3. Ma P.C. et. al. / Applied Science and Manufacturing. 2010. Vol. 41. P. 1345–1367.
4. Kumanek B., Janas D. / Journal of Materials Science. 2019. Vol. 54. P. 7397–7427.
5. Cruz H., Bui D.N., Son Y. / Journal of Applied Polymer Science. 2021. Vol. 139.
6. Lehman J.H. et. al. / Carbon. 2011. Vol. 49. P. 2581–2602.

THIN FILMS FOR MICROWAVE ABSORPTION AND TERAHERTZ APPLICATIONS

**^aBychanok D., ^bPadrez Y., ^aLiubetski N., ^aArlouski A., ^aKushniarou U., ^aKorobov I.,
^aHalimski I., ^aKulahava T., ^aDemidenko M., ^bUrbanowicz A., ^bMacutkevic J.**

^aInstitute of Nuclear Problems of Belarusian State University, Minsk, Belarus

^bCenter for physical sciences and technology, Vilnius, Lithuania

The cheap thin films are proposed for shielding and absorption applications for frequencies up to 1 THz. The electromagnetic properties of commercially available window tinting films were studied in microwave (12-18 GHz) and terahertz (0.2-1.0 THz) frequency ranges. The optical and infrared characteristics of tinting films are precisely controlled during the fabrication process at the factory. In certain cases, the fine control of optical properties can also be used for extended additional applications in the lower frequency ranges: terahertz and microwave.

The reflection and transmission coefficients of two different series of window tint films were experimentally measured and compared with optical characteristics. The equivalent sheet resistance of studied samples was estimated from measured experimental data.

The obtained results demonstrate the significant potential of using toning films for microwave and terahertz applications.

QUANTUM-CHEMICAL MODELING OF DOXORUBICIN-FULLERENOL AGENTS OF CANCER THERAPY

^aDikusar E.A., ^aPushkarchuk A.L., ^aBezyazychnaya T.V., ^aAkishina E.A., ^bSoldatov A.G.,
^cKuten S.A., ^dStepin S.G., ^eNizovtsev A.P., ^eKilin S.Ya., ^fKulchitsky V.A., ^aPotkin V.I.

^a*Institute of Physical Organic Chemistry of NAS of Belarus Minsk, Belarus*

^b*Scientific-Practical Materials Research Centre of NAS of Belarus, Minsk, Belarus*

^c*Institute for Nuclear Problems, Belarusian State University, Minsk, Belarus*

^d*Vitebsk State Order of Peoples' Friendship Medical University, Vitebsk, Belarus*

^e*B.I. Stepanov Institute of Physics of NAS of Belarus, Minsk, Belarus*

^f*Institute of Physiology of NAS of Belarus Minsk, Belarus*

In order to therapeutically destroy neoplasms chemotherapy or radiotherapy is usually applied, and in isotope medicine – short-lived radio nuclides are injected into the tumor (⁵⁹Fe, ⁹⁰Y, ⁹⁵Zr, ^{99m}Tc, ¹⁰⁶Ru, ^{114*}In, ¹⁴⁷Eu, ¹⁴⁸Eu, ¹⁵⁵Eu, ¹⁷⁰Tm, ^{177m}Lu, ¹⁸⁸Re, ²¹⁰Po, ²²²Rn, ²³⁰U, ²³⁷Pu, ²⁴⁰Cm, ²⁴¹Cm, ²⁵³Es). Binary (or neutron capture therapy) – a technology developed for the selective effect on malignant tumors and using drugs tropic to tumors containing non-radioactive nuclides (¹⁰B, ¹¹³Cd, ¹⁵⁷Gd at al.). Triadic - the sequential introduction into the body of a combination of two or more separately inactive and harmless components, tropic to tumor tissues and capable of selectively accumulating in them or entering into chemical interaction with each other and destroying tumor neoplasms under the influence of certain sensitizing external influences. The aim of this work is quantum-chemical simulation of the electronic structure and analysis of the thermodynamic stability of new doxorubicin-fullerenol agents for the treatment of tumor neoplasms. The need for preliminary studies of modeling such objects is due to the extremely high labor intensity, cost and complexity of their practical production. Previously, we presented data on quantum chemical modeling of the structure and electronic structure of chemotherapy drug methotrexate [1] and cortisone fullereneol clusters [2, 3].

The need for preliminary modeling of such objects is due to the extremely high labor intensity and complexity of their production. In this work, *ab initio* quantum-chemical calculations of a number of potential agents for the diagnosis and therapy of cancer diseases, C₆₀ fullereneol derivatives, are applied. Connection calculations were carried out by the DFT method using the B3LYP1/MIDI theory level using the GAMESS software package and the MIDI basis set. To increase the effectiveness of these drugs, it is promising to introduce into the composition of their molecules structural fragments of known dosage forms, for example, doxorubicin. This report presents the results of quantum-chemical modeling of the structure and electronic structure of endohedral doxorubicin-fullerenol clusters.

⁹⁰Y, ²¹⁰Po and ²²²Rn were chosen as endohedral components of inclusion in the inner spheres of clusters. Emphasis on these supramolecular objects of inclusion in the inner cavities of both fullereneol itself and monodoxorubicin-fullerenol or bisdoxorubicin-fullerenol clusters is due to the fact, that radionuclides are sources of therapeutic ionizing α -radiation [4].

References

1. Дикусар Е.А. и др. / Весці НАН Б. Сер. хім. навук. 2019. Т. 55, № 2. С. 163–170.
2. Дикусар Е.А. и др. / Весці НАН Б. Сер. хім. навук. 2021. Т. 57, № 4. С. 400–407.
3. Дикусар Е.А. и др. / Вестник фармации. 2021. № 3 (93). С. 64–72.
4. Bergmann H. et. al. – Basel: Rirkhäuser Verlag, 1995. – 300 p.

PECULIARITIES OF CVD MOS₂ SYNTHESIS FOR GRAPHENE HETEROSTRUCTURES

^aKondrashov I.I., ^{a,b}Fedotov P.V., ^{a,b}Obraztsova E.D.

^a*Prokhorov General Physics Institute of Russian Academy of Sciences, Moscow, Russia*

^b*Moscow Institute of Physics and Technology (National Research University), Moscow Region,
Russia*

Research on graphene in thin-film heterostructures has been very active in recent years. Such structures have enormous potential for applications in electronics, sensors, solar cells, and more, due to the combination of the unique electrical and optical properties of each material. Among them, graphene/MoS₂ heterostructures demonstrate highly sensitive photodetection and good contact properties that provide efficient injection and charge transfer. CVD synthesis method is excellent for obtaining such heterostructures. But unlike a graphene, the MoS₂ synthesis is bigger challenge because of the presence of two elements and the different operating temperatures of the precursors.

In this work we present a detailed study of the CVD synthesis of molybdenum disulfide from solid precursors on SiO₂/Si substrate for further use in graphene/MoS₂ heterostructures. The effect of changes in temperature, pressure, precursor amount, gas flow rate, and substrate position on the structure and properties of the obtained film was evaluated. Precise control of these synthesis parameters makes it possible to obtain films with a controlled number of layers, defectiveness and homogeneity. Raman spectroscopy and photoluminescence were used to characterize the properties of the MoS₂ films.

The work was supported by Russian Science Foundation according to the research projects № 21-72-10164 and President Program for young scientist SP-5712.2021.3.

CAVITY METHOD OF POLARIZABILITY AND PERMITTIVITY MEASUREMENTS OF SPHERICAL COMPOSITE OBJECTS

^{a,b}**Korobov I.D.**, ^b**Demidenko M.I.**, ^b**Bychanok D.S.**

^a *Belarusian State University, Minsk, Belarus*

^b *Institute for Nuclear Problems of Belarusian State University, Minsk, Belarus*

Measuring complex dielectric characteristics of materials at microwave frequencies is becoming increasingly important, particularly in various sectors such as material science, microwave circuit design, absorber development, and so on. Many approaches, such as time domain or frequency domain techniques with one or two ports, have been devised to measure these complex parameters. It's impossible to measure permittivity directly. Computations are made with the help of other quantifiable factors such as propagation constant, transmission/reflection coefficients, and resonance frequency [1, 2].

In this research, we investigate the cavity method of polarizability and permittivity measurements of spherical composite objects. The method is to measure the eigenfrequencies of a cavity resonator with and without a ball inside. The technique is not new. It is described in a lot of papers, where a ball is treated as a small perturbation [2, 3]. The main problem of the method appears while calculating the permittivity. The values of polarizability remain unchanged from measurement to measurement, but the values of permittivity change significantly. A small variation of experimental results leads to a completely different complex value of permittivity.

The novelty of our work lies in a study of the stability of the numerical method which is used for calculating complex dielectric permittivity and polarizability. Also, we study the impact of a sphere's radius on the results. A comparison of theoretical results to experimental is made.

References

1. Priou A. Dielectric properties of heterogeneous materials. – Elsevier Science Limited, 1992.
2. Kumar A., Sharma S., Ghanshyam S. / Progress In Electromagnetics Research. 2007. Vol. 69. P. 47-54.
3. Landau L. D. Electrodynamics of continuous media, Landau and Lifshitz course of theoretical physics vol. 8, 1984.

NEW METHODS FOR SYNTHESIS AND MODIFICATION OF NANOCARBONS

**^a Krasnikov D.V., ^{a,b} Khabushev E.M., ^{a,b} Novikov I.V., ^a Grebenko A.K., ^{a,b} Bogdanova A.R.,
^a Alekseeva A.A., ^a Ramirez J.A.B., ^a Raginov N.I., ^a Iakovlev V.Ya., ^{a,b} Nasibulin A.G.**

^a Skolkovo Institute of Science and Technology, Moscow, Russia

^b Aalto University School of Chemical Engineering, Espoo, Finland

Being one of the few elements known since prehistoric times, carbon has been continuously modified throughout history: through understanding the phenomenon of allotropy (graphite/diamond) and the theory of the structure of organic species (a vivid example is the detective story of determining the structure for benzene) to self-organizing dissipative systems (fullerenes) and two-dimensional materials (graphene). A wide range of applications of carbon nanomaterials includes antistatic and functional coatings, reinforced materials, as well as smart surfaces and sensors providing a high commercial interest. At the same time, a constantly updated list of new promising solutions in the field of medicine (drug delivery and biocompatible electrodes), telecommunications (single-photon emitters and terahertz optics), robotics (sensitive elements and elastic electronics of artificial skin) explains the special attention from the scientific and technological community.

The present work is devoted to the creation of carbon nanomaterials with tailored characteristics as well as corresponding devices. An important aspect of the work is a development of a new type of continuous reactors for chemical vapor deposition on the surface of an aerosol catalyst. In contrast to classical methods relating to metalorganic volatile compounds, we implement a tandem approach using an aerosol spark discharge generator of catalytic particles. We show that the proposed method not only provides nanotubes with characteristics comparable to classical approaches, but also facilitates the scaling of the reactor by separating the zones of generation of catalytic particles and catalytic process. Moreover, the optimal activation conditions and residence time of the catalyst were determined, which allowed an order of magnitude increase in the productivity of the process and a gain in the quality of nanotube-based transparent electrodes.

A deep understanding of the processes on the surface of the catalyst during the Boudouard reaction yielded a breakthrough process for obtaining graphene, a material associated with the development of new-generation electronics. However, the unique properties of graphene are incompatible with defects in its structure including grain boundaries. Recently, we proposed a simple technology for producing graphene using carbon monoxide as a source under atmospheric or elevated pressure. At the same time, the size of graphene crystals was limited only by the laboratory scale reactor (several cm), and the material was of a single layer only.

At the same time, to “solve” the complex and multiparametric process of synthesis of single-walled carbon nanotubes (one of the central tasks of nanotechnology over the past 30 years) a new approach was proposed. In the works of the applicant, the possibility of integrating machine learning methods for predicting synthesis results (as well as its advanced optimization) was shown for the first time. The developed technology is the key for the industrial processes with autonomous optimization and selection of parameters, which in the future will reduce the costs of the corresponding devices. It is important to note that the accumulated results allowed not only to develop a fundamental understanding of the processes occurring on the surface of the catalyst and carbon nanomaterials but to implement a number of elastic electronics devices with improved characteristics (conductive electrodes, regenerated protective membranes, mechanical sensors, THz optics components). Moreover, this resulted in a multiplicative effect for related fields (photonics and telecommunications (in particular fiber lasers and emitters), sensors (gas sensors), and electronics (elastic LEDs).

This work was supported by the Russian Science Foundation grant No. 20-73-10256 and the Council on grants of Russian Federation (grant number HIII-1330.2022.1.3).

SIMULATION OF ^{13}C - ^{13}C J-COUPLING TENSORS IN DIAMOND CLUSTERS HOSTING THE NV COLOR CENTER

^{a,b}Nizovtsev A.P., ^{b,c}Pushkarchuk A.L., ^dKuten S.A., ^eMichels D., ^eLyakhov D.,
^bKargin N.I., ^bGusev A.S., ^aKilin S.Ya.

^a*Institute of Physics, NAS of Belarus, Minsk, Belarus.*

^b*National Research Nuclear University “MEPhI”, Moscow, Russia.*

^c*Institute of Physical and Organic Chemistry of NAS of Belarus, Minsk, Belarus.*

^d*Institute for Nuclear Problems, Belarusian State University, Minsk, Belarus.*

^e*Computer, Electrical and Mathematical Science and Engineering Division,
4700 King Abdullah University of Science and Technology (KAUST), Thuwal, Saudi Arabia.*

In the past decade there was rapid progress in development of quantum magnetic sensing technologies based on nitrogen-vacancy (NV) color centers in diamond (see, e.g. [1,2] for recent reviews). Magnetometer based on single NV center can have nanometer-scale spatial resolution and exceptional sensitivity allowing to detect target single ^{13}C nuclear spins or coupled ^{13}C - ^{13}C pairs located within the diamond which can be used as long-lived quantum memory [3]. In these respects, predicting of high-resolution NMR characteristics for studied spin systems is essential. Among them, those of indirect nuclear spin–spin coupling (the J -coupling), that arise due to second-order hyperfine interactions with the ^{13}C - ^{13}C bond electrons, are important. Here we are presenting our recent results (see also [4]) of simulation of **full tensors** J_{KL} ($K, L = X, Y, Z$) describing the J -couplings of nuclear spins ^{13}C in H-terminated NV-hosting diamond clusters.

We have optimized the cluster geometry using the ORCA 5.0.1 software package with the B3LYP/def2/J/RIJCOSX level of theory and then simulated the n -bond J -coupling **tensors** ${}^nJ_{KL}$ for all possible ^{13}C - ^{13}C pairs in the clusters using B3LYP/TZVPP/AUTOAUX/decontract level of theory. We found that, in addition to usually considered isotropic Fermi-contact contribution to J_{KL} , the anisotropic contributions resulted from dia- and paramagnetic, spin-dipolar and spin-dipolar/Fermi-contact cross terms are essential and can manifest in NMR spectra of ^{13}C dimers recorded using the NV centers.

The calculated values of scalar J -constants ${}^nJ = \text{Sp}({}^nJ_{KL})/3$ for different $^{13}\text{C}_i$ - $^{13}\text{C}_j$ pairs in the exemplary $\text{C}_{33}[\text{NV}]\text{H}_{36}$ cluster are shown in the Fig. 1. The highest ones are those for neighboring ^{13}C : one-bond constant 1J were 30-37 Hz depending on the position of the ^{13}C dimer in the cluster with respect to the NV center.

Using the same theory level we also simulated full tensors ${}^nJ_{KL}$ for the adamantane and found that for this molecule the calculated value ${}^1J = \text{Sp}({}^1J_{KL})/3 = 29.9$ Hz correlates well with the isotropic constant ${}^1J = 31.4$ Hz obtained experimentally in [5].

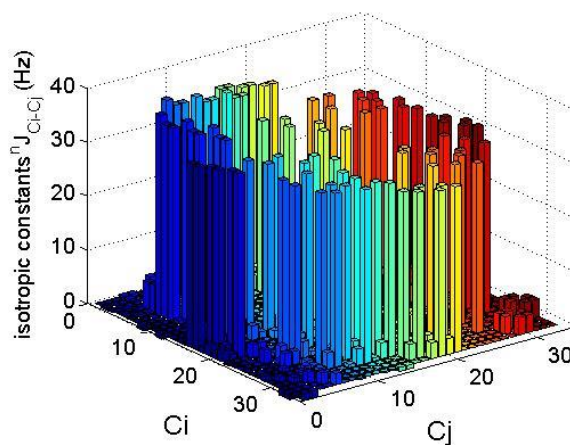


Figure1. Simulated isotropic 1J constants for all possible ^{13}C dimers in the $\text{C}_{33}[\text{NV}]\text{H}_{36}$ cluster.

References

1. Schwartz I. et al. / Sci. Rep. 2019. Vol. 9. P. 6938.
2. Barry J.F. et al. / Rev. Mod. Phys. 2020. Vol. 92. P. 015004.
3. Chen Q. et al. / Phys. Rev. B. 2017. Vol. 95. P. 224105.
4. Nizovtsev A. et al. / Mater. Proc. 2022. Vol. 9. P. 4.
5. Gay I.D. et al. / J. Magn. Res. 1991. Vol. 91. P. 185.

THEORETICAL DESCRIPTION OF ELECTROMAGNETIC RADIATION INTERACTION WITH GRAPHENE METASURFACES

^{a,b}Novitsky A., ^bPaddubskaya A.

^a Belarusian State University, Minsk, Belarus

^bInstitute for Nuclear Problems of Belarusian State University, Minsk, Belarus

Graphene is a remarkable two-dimensional material able to govern light at subwavelength scale. It enriches the fields of electronics, photonics and material science paving the avenues for field effect transistors, broadband absorbers and structures of twisted bilayer graphene.

We consider a graphene metasurface composed of three types of unit cells: hemispheres, volcanos and holes. Volcanos and holes are respectively partly and completely broken hemispheres. Such a metasurface with randomly located unit cells was produced owing to the fabrication defects as discussed in [1]. Scattered electromagnetic radiation can be described by the Kirchhoff diffraction theory, which within the Fraunhofer approximation is reduced to the scattering by a unit cell averaged over three types of unit cells [2]. The graphene unit cells of different types are accounted for with their own weight coefficients borrowed from the experimental studies [1]: 60% of hemispheres, 35% of volcanos and 5% of holes. Using the Drude-like formula for graphene surface conductivity we calculate the reflectivity and transmissivity from the diffraction theory and absorptivity of the graphene metasurface as $A=1-R-T$.

We find out that the electromagnetic response of hemispheres is significantly suppressed due to the formation dark modes as a result of antiparallel dipole moments of the flat graphene and graphene hemisphere. The corresponding reduction of the metasurface reflection is the origin of its high absorptivity. Moreover, the fields scattered by randomly arranged unit cells of different types are added incoherently despite comparable unit cell size and wavelength, thus justifying the use of averaging over unit cells. The proposed theory fully confirms experimental results, both the value of the transmitted power and the angular dependence.

One of the fascinating outcomes of the research is the extremely high and broadband absorptivity [2] of the considered graphene metasurface (around 80% at 0.1 THz, 98% at 10 THz). Further increase of the frequency violates the Drude model of conductivity and, therefore, is not discussed. We reveal that the Fermi energy should be around 0.1 eV, the radius of the hemisphere about 200-300 nm (unit cell size is 611 nm) and the share of hemispherical unit cells is 30-60% to achieve the highest absorptivity. It is curious that one needs unit cells of the volcano type to maximize the absorptivity.

To sum up, we develop a theory for description of random graphene metasurfaces composed of several types of unit cells. Our results provide the opportunity for fabrication of thin near-perfect absorbers as well as tailoring spectral characteristics of graphene membranes.

References

1. Baah M. et. al. / Carbon. 2021. Vol. 185. P. 709.
2. Novitsky A. et. al. / Phys.Rev.Appl. 2022. Vol. 17. P. 044041.

SYNTHESIS AND CAPACITIVE PROPERTIES OF COMPOSITES BASED ON POLYANILINE DEPOSITED AT FREE-STANDING SINGLE-WALLED CARBON NANOTUBES

^aPanasenko Iu.V., ^bBulavskiy M.O., ^{a,b,c}Iurchenkova A.A., ^dAguilar-Martinez Ye.,
^bFedorov F.S., ^{a,c,e}Fedorovskaya E.O., ^fMikladal B., ^cKallio T., ^{b,c}Nasibulin A.G.

^a*Novosibirsk State University, Novosibirsk, Russia*

^b*Skolkovo Institute of Science and Technology, Moscow, Russia*

^c*Aalto University, Aalto, Finland*

^d*Uppsala University, Uppsala, Sweden*

^e*LUT University, Lappeenranta, Finland*

^f*Canatu Ltd, Vantaa, Finland*

Flexible and lightweight supercapacitors are being actively developed to meet the growing demands of modern wearable electronics, and, also, to enable easy rolling-up packaging to make devices with high nominal values. Single-walled carbon nanotube (SWCNT) films are well-known materials for applications in flexible, wearable devices. However, using the films only might be challenging due to their insufficient capacitance being originated from double electrical layer charging. A great improvement might be approached by making composites with materials that possess pseudocapacitive properties, like a soft mater, polyaniline (PANI) polymer. Still, the synthesis of PANI over SWCNTs needs adjustment to ensure the best functional properties [1].

Here, we study the synthesis and capacitive properties of supercapacitors based on PANI electrochemically deposited on free-standing films of SWCNT.

The utilized SWCNT films served as a substrate for PANI in situ deposition, to be later applied as a current collector, thus, ensuring “dead-weight” free flexible supercapacitor architecture. The structure and morphology of synthesized material have been evaluated by means of several techniques, like Raman spectroscopy, scanning, and transmission electron microscopy. Capacitance performance was assessed by cyclic voltammetry, galvanostatic charging-discharging, etc. Our results suggest that the thickness of the SWCNTs plays a crucial role in capacitance and its retention depending on the way contacts are realized, i.e. via SWCNTs or PANI. The maximum achieved specific gravimetric capacitance reaches 541 F g⁻¹.

References

1. Panasenko Iu.V. et. al. / J. Power Sources. 2022. Vol. 541. P. 231691.

CRYSTAL POLARITY DISCRIMINATION IN GaN NANOWIRES ON GRAPHENE

^{a,b}**Pavlov A.**, ^a**Mozharov A.**, ^c**Berdnikov Y.**, ^d**Barbier C.**, ^d**Harmand J-C.**,
^d**Tchernycheva M.**, ^{a,e}**Polozkov R.**, ^{a,e}**Mukhin I.**

^a*Alferov University, St. Petersburg, Russia*

^b*Peter the Great St.Petersburg Polytechnic University, St.Petersburg, Russia*

^c*St. Petersburg State University, St. Petersburg, Russia*

^d*Centre de Nanosciences et de Nanotechnologies (C2T), Palaiseau, France*

^e*ITMO University, St. Petersburg, Russia*

In this work we report an *ab-initio* study of the preferred polarity for wurtzite GaN nanostructures on virtual graphene substrates. By means of the density functional theory analysis we show that N-polar nanostructures on graphene are energetically favorable in comparison to Ga-polar. These findings are in agreement with experimentally observed N-polarity of wurtzite GaN nanowires grown on graphene substrate. We believe that the revealed polarity preference is of importance for piezoelectric and optoelectronic device design.

The density functional theory (DFT) calculations were used to determine the most energetically preferable geometry of the GaN nanocluster on graphene. Such a cluster can represent the nucleus of GaN nanoisland or nanowire. To reproduce the hexagonal symmetry of the wurtzite structure at least ten gallium and ten nitrogen atoms should be considered. In addition sixty more carbon atoms form the monolayer graphene lattice.

This model system allows eight possible geometric configurations of GaN nanocluster: four Ga-polar and four N-polar. DFT calculations were made in the plane-wave basis set for projector augmented-wave method implemented in GPAW package [1]. The calculations were carried out using the Perdew–Burke–Ernzerhof generalized gradient approximation for exchange-correlation functional, with the plane wave energy cutoff set to 450 eV and *k*-space sampling in 4×4×4 Monkhorst-Pack grid.

We observe that only two out of eight configurations are found to be stable during the energy optimization. The initially Ga-polar cluster changed the Ga-N dipole orientation during the optimization procedure. Meanwhile, the initially N-polar nanocluster only adjusted its shape while keeping the initial arrangement of the atomic planes and the Ga-N dipole orientation. Thus, both stable configurations evolve to N-polar geometry corresponding to minimal cluster energy.

To summarize, the presented DFT study has shown that N-polar GaN structures on graphene substrates are energetically preferable to Ga-polar ones. Among different possible configurations of Ga and N atoms in the cluster only the N-polar one is stable while the initially Ga-polar structure demonstrates the change of polarity during the *ab-initio* optimization. The DFT modeling results are consistent with the experimental observations of exclusive N-polarity of GaN nanowires grown on graphene layer on top of silicon substrate [2, 3].

The work was financially supported by the Russian Science Foundation under the grant 22-19-00494. We acknowledge the Supercomputing Center of Peter the Great Saint-Petersburg Polytechnic University for providing the opportunities to carry out large scale simulations.

References

1. Enkovaara J. et al. / J. Phys.: Condens. Matter. 2010. T. 22. №. 25. C. 253202.
2. Pavlov A. et al. / J. Mater. Chem. C. 2021. T. 9. №. 31. C. 9997-10004.
3. Pavlov A. et al. / J. Phys.: Conf. Series. IOP Publishing. 2021. T. 2015. №. 1. C. 012105.

AB-INITIO STUDY OF ELECTRONIC PROPERTIES OF 2D AND 3D REGULAR ARRAYS OF CARBON NANOTUBES

^{a,b,c}Polozkov R.G., ^{a,b}Pavlov A.V., ^{c,d}Portnoi M.E., ^{c,e}Shelykh I.A.

^a*Alferov University, (Former St Petersburg Academic University), Saint Petersburg, Russia*

^b*Peter the Great St.Petersburg Polytechnic University, St.Petersburg, Russia*

^c*ITMO University, Saint Petersburg, Russia*

^d*School of Physics, University of Exeter, Exeter, United Kingdom*

^e*Science Institute, University of Iceland, Reykjavik, Iceland*

Carbon nanotubes (CNT) [1] and more complex systems constructed on the basis of CNTs have attracted great attention due to their unique electronic and mechanical properties. For example, results of experimental studies of self-assembled horizontally aligned carbon nanotube arrays were recently published [2]. In this work the equilibrium geometry and electronic band structure of 2D and 3D regular arrays of CNT are studied with use of the density functional theory (DFT). The many-electron correlations and van der Waals corrections are taken into account. The optimal distance between CNT in the array corresponding to the minimum of the total energy of the system is found.

The initial preparations of the system were performed using Atomic Simulation Environment (ASE) library [3]. The DFT calculations were done by means of projector-augmented waves method implemented in GPAW [4] software package. The wave functions were represented in uniform real-space grid with periodic boundary conditions. For k-space sampling, the 10x10x6 Monkhorst-Pack grid in case of 3D array and the 10x6x6 grid for 2D arrays were used. For DFT calculations we used the generalized gradient approximation with PBE exchange correlation functional and van der Waals (vdW) correction (optPBE-vdW). The analysis were performed for both quasi metallic (15,0) tubes and semiconducting (16,0) tube, as well as for mixture of quasi-metallic and semiconducting tubes. The three dimensional CNT arrays were created by applying periodic boundary conditions to the hexagonal unit cell. For (15,0) and (16,0) there was one tube per unit cell, while for mixture of quasi-metallic and semiconducting tubes there were two CNTs. To construct 2D array of CNTs the 10 angstrom vacuum gap was created along y direction.

We have found that 2D and 3D regular array of CNTs separated by an optimal distance governed by van der Waals forces have a strongly anisotropic hyperbolic dispersion for its low-energy charge carriers. Thus, we have predicted a new type of hyperbolic van der Waals material with a rich energy spectrum promising interesting physical effects and optoelectronic applications.

We acknowledge the Supercomputing Center of Peter the Great Saint-Petersburg Polytechnic University for providing the opportunities to carry out large scale simulations.

References

1. Iijima S. / Nature. 1991. Vol. 354. P. 56.
2. Zhang R., Zhang Y., Wei F. / Chem. Soc. Rev. 2017. Vol. 46. P. 3661.
3. Larsen A.H. et. al. / J. Phys.: Condens. Matter. 2017. Vol. 29. P. 273002.
4. Enkovaara J. et al. / J. Phys.: Condens. Matter. 2010. Vol. 22. №. 25. P. 253202.

VANADIUM FOG – DIRECT COATING OF CARBON NANOTUBES BY V₂O₅ IN AEROSOL STATE

**^aRaginov N.I., ^aKurtukova T.N., ^aFaichu N., ^aIlatovskii D.A., ^aKopylova D.S.,
^aFedorov F.S., ^aKrasnikov D.V., ^{a,b}Nasibulin A.G.**

^aSkolkovo Institute of Science and Technology, Moscow, Russia

^bAalto University School of Chemical Engineering, Espoo, Finland

Vanadium pentoxide(V₂O₅) has been extensively studied for gas sensing and bolometer applications because of its unique electrical and optical properties. It has been reported that vanadium pentoxide possesses temperature sensitive properties that boost the implementation in bolometers. Moreover, V₂O₅ ability to adsorb and chemically interact with different gases integrated with pronounced band structure makes it a promising candidate for gas sensors. It should be mentioned that vanadium pentoxide also provides stable p-type doping of single-walled carbon nanotubes (SWCNTs).

However, vanadium oxide nanoparticles cannot be implemented easily to form an electrically conductive continuous or even a free-standing film that can be transferred on any kind of a substrate for further applications. Also, in case of gas sensors high resistance of V₂O₅ inhibits the detection of response. Addition of carbon nanotubes to V₂O₅ matrix might address these problems. However, each nanotube should be wrapped by V₂O₅ to reach the full potential of the composite. Nevertheless, high energy of interaction between nanotubes limits the disruption of the junctions between nanotubes. As the result of commonly used methods like spin- or dip-coating, SWCNTs on the surface of the film are covered with material but intersections between nanotubes are remained.

Here we propose a new method, “Vanadium Fog”, for the functionalization of SWCNTs with V₂O₅. The method comprises the mix aerosol of individual SWCNTs right after the aerosol CVD synthesis with for (aerosol) of vanadium oxytriisopropoxide in isopropyl alcohol. As the result, each carbon nanotube is soaked with droplets of solution followed by alcohol evaporation. To promote the conversion of vanadium oxytriisopropoxide into V₂O₅ via the hydrolysis/polycondensation mechanism, before deposition flow is diluted with wet air. Resulted carbon nanotubes coated with vanadium oxide are collected on nitrocellulose filter for transferring onto any other substrate for further application. Thereby, every SWCNT is covered with doping material and in the resulted films there is no any direct intersections between nanotubes.

The vanadium results in thin films with conductivity below pristine nanotubes but higher than that for pure V₂O₅. Temperature coefficient of resistance (TCR) measurements were conducted to investigate SWCNTs coated with V₂O₅ for bolometer application. Different behavior of conductivity of pristine SWCNT films with films of SWCNTs coated with vanadium proves the formation of nanotube junctions through V₂O₅. Aerosol coating leads to improvement composite performance as component of bolometers and gas sensors. The obtained composite films were transferred onto silica substrate with predeposited circuits for gas sensor application. Combination of carbon nanotubes with V₂O₅ showed higher sensitivity to volatile organic compounds than that for pure nanotubes and vanadium pentoxide.

Research was conducted with financial support of RSF 22-13-00436.

RENEWABLE SINGLE-WALLED CARBON NANOTUBE MEMBRANES FOR EXTREME ULTRAVIOLET PELLICLE APPLICATIONS

^a Ramirez J.A.B., ^a Krasnikov D.V., ^{b,c} Gubarev V.V., ^{a,d} Novikov I.V., ^a Kondrashov V.A., ^a Starkov A.V., ^c Krivokorytov M.S., ^{b,c} Medvedev V.V., ^a Gladush Yu.G., ^{a,d} Nasibulin A.G.

^a Skolkovo Institute of Science and Technology, Moscow, Russia

^b Moscow Institute of Physics and Technology, Dolgoprudny, Russia

^c Institute for Spectroscopy of the Russian Academy of Science, Moscow, Russia

^d Aalto University School of Chemical Engineering, Espoo, Finland

We propose a facile, cost-efficient, environmentally friendly, and scalable process to renew single-walled carbon nanotube membranes serving as extreme ultraviolet (EUV) protective pellicles. The method comprises of high-temperature treatment of the membrane by Joule (resistive) heating at temperatures higher than 1000 °C and pressure below 0.3 Pa. Using model Sn aerosol nanoparticles, the primary contaminant from extreme ultraviolet light sources, we demonstrate the proposed method to clean the membrane with the power consumption as low as 20 W/cm². We show the proposed method to cause no harm to carbon nanotube structure, opening a route towards multiple membrane renovation (Figure 1). We confirm the applicability of the approach using in situ deposition from the semi-industrial EUV light source and subsequent Sn-based contaminant removal, which restores the EUV-UV-vis-NIR transmittance of the film and, therefore, the light source performance. The proposed method supports pulse-cycling opening an avenue for enhanced protection of the lithography mask and stable performance of the EUV light source. Additionally, the approach suits other composite contaminants based on such species as Pb, In, Sb, *etc.*

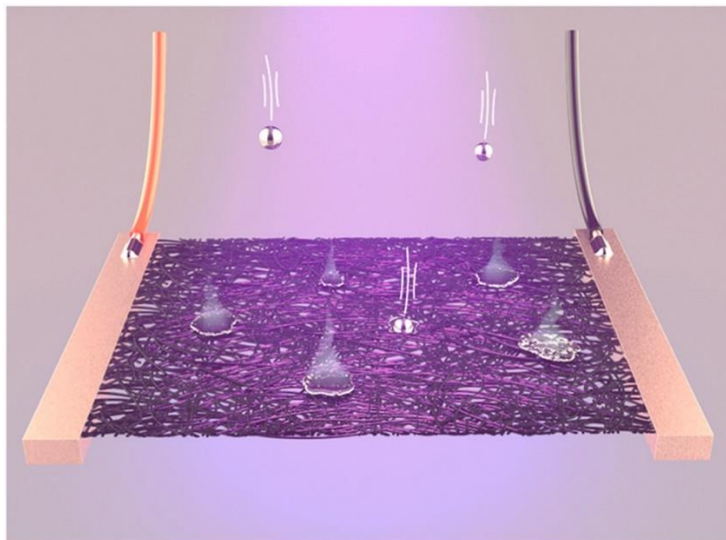


Figure 1. Deposition of In/Sn nanoparticles emitted by an EUV source on SWCNT membrane with a removal of contaminants using Joule heating.

This work was partially supported by the Council on grants (project for young scientists number MK-3000.2022.1.3).

A NOVEL HONEYCOMB STRUCTURE COMBINED WITH GRAPHENE AEROGEL AND COATING FOR HIGH-PERFORMANCE ELECTROMAGNETIC WAVE ABSORPTION

Shuangqiang Shi, Cheng Yang, Yubin Chen, Hairong Chu

¹ *Research Center of Graphene Applications, Beijing Institute of Aeronautical Materials, Beijing, China*

² *Beijing Institute of Graphene Technology, Beijing, China*

The development and application of electromagnetic (EM) wave absorbing materials are of great importance to EM radiation protection and radar stealth technology [1]. On the way toward high-performance EM wave absorbers, graphene materials with light weight and broad absorption bandwidth appear as promising candidates [2, 3]. Herein, a wave-absorbing honeycomb simulation calculation model combined with three-dimensional graphene aerogel and conductive graphene coating was creatively developed to investigate structural absorbing materials. The permittivity values of graphene aerogel and coating, as well as the coating thickness and height, have profound effects on the EM wave absorption properties of the structure and were firstly optimized by EM simulation software. Subsequently, the wave-absorbing honeycomb sample based on the simulated parameters was fabricated and tested. A parallel study between simulation and experiment showed that the reflection loss values of the optimized honeycomb sample can reach -10 dB in the frequency range from 2.5 GHz to 18 GHz. In conclusion, this work demonstrates that the overall tendency of the measured results was in good agreement with the simulated results, and gives original and new perspectives on the design of graphene materials for EM wave absorption.

References

1. Huang Y. et al. / Carbon. 2021. Vol. 177. P. 79–89.
2. Quan L. et al. / Chemical Engineering Journal. 2022. Vol. 428. P. 131337.
3. Yang C. et al. / Carbon. 2017. Vol. 117. P. 301–312.

CHARGE-INDUCED STRUCTURE MODULATIONS OF 1D-IODINE INSIDE THIN SWCNTs

^{a,b} Tonkikh A.A., ^{a,c} Rybkovskiy D.V., ^{a,b} Obraztsova E.D.

^a *Prokhorov General Physics Institute of Russian Academy of Sciences, Moscow, Russia.*

^b *Moscow Institute of Physics and Technology (National Research University), Moscow, Russia.*

^c *Skolkovo Institute of Science and Technology, Moscow, Russia.*

In our work we present an experiments on charge induced change in the structure of one-dimensional iodine objects formed inside single-walled carbon nanotubes. We used electrochemical doping of the electrode made of filled nanotubes for controlled charging. For this purpose we designed simple supercapacitor-type electrochemical cells. Electrochemical charging of the filled nanotube leads to charging of one-dimensional iodine inside, as a result changing its geometry and properties. For instance, modulation with the trimer formation should be observed in one-dimensional atomic chains [1]. In our case we change the base unit that makes up the one-dimensional iodine. As the number of electrons in the filled nanotube increases, the base element, I_5^- , changes to I_3^- . Due to the fact that each anion has the unique Raman modes, Raman measurements allowed us to observe these modulations in-situ. Iodine in this experiment turned out to be a convenient object for research. This picture based on the characterization of individual molecular anions during modulation of the whole one-dimensional structure, provides a deeper insight into the structural and phase transitions of Peierls type.

For applications, these results are a step toward the production of nanoscale elements whose properties can be modulated, and the most important, these changes can be detected and predicted.

The synthesis of I@SWCNTs and electrochemical measurements were funded by RSF № 22-22-00554. The Raman studies were funded by RSF № 20-42-08004. Density-functional computations of iodine molecular anions were funded by RSF № 22-22-00555.

References

1. Komsa H.-P. et. al. / Nano Lett. 2017. Vol. 17 (6). P. 3694–3700.

GRAPHENE RAMAN SPECTRA FEATURES IN THE GRAPHENE/hBN HETEROSTRUCTURE DEPOSITED ON SiO₂/Si SUBSTRATE

^aTsyhanok D.V., ^aPaddubskaya A.G., ^aValynets N.I., ^aBatrakov K.G., ^bKorolik O.V.

^aInstitute for Nuclear Problems of Belarusian State University, Minsk, Belarus

^bBelarusian State University, Minsk, Belarus

2D materials based heterostructures possess unique tunable properties [1] that can be used to develop new principles for thin-film electronics devices assembling. 2D materials such as graphene, transition metal dichalcogenides (TMD), hexagonal boron nitride (hBN), black phosphorus, silicene, germanene and etc. are of the great scientific interest today. Raman spectroscopy is one of the most effective and wide used non-invasive tools for analyzing properties of 2D materials and graphene in particular.

We used mechanical exfoliation to obtain graphene and hBN flakes. Graphene/hBN heterostructures on SiO₂/Si substrate were assembled with a dry transfer process following Wang et. al. [2]. A Certus Light V AFM atomic force microscope was used to evaluate surface morphology of the fabricated samples. Raman spectroscopy analysis and optical microscopy were performed by using Nanofinder High End (Tokyo Instruments) confocal system. Laser wavelengths were 532 nm and 473 nm, laser powers were 2 mW and 2.4 mW correspondingly. All spectra were collected using 100x objective with NA = 0.95 and the spectral resolution was around 3 cm⁻¹.

The analysis of the 2D and G peaks intensity ratio (I_{2D}/I_G) distribution showed that I_{2D}/I_G depends on the laser wavelength and increases if graphene is covered with hBN compared to the areas with uncovered graphene.

It has been shown that graphene doping level on the SiO₂/Si substrate is dependent on the power of the excitation radiation. Laser power increase leads to initial *p*-type doping, caused by interaction with substrate, change to *n*-type. But we didn't observe the same dependence in case of graphene covered with hBN.

Statistical analysis of the obtained graphene Raman spectra showed that the presence of the additional hBN layer on top of the graphene in the graphene/hBN heterostructures results in the additional graphene compression ($\epsilon \sim -0,2\%$) and doping level decrease [3].

We showed that sample high temperature annealing (400 °C) in vacuum (10⁻⁶ mBar) results in the doping level decrease of the graphene on the SiO₂/Si substrate, but this effect can be reversed if the sample is exposed to the air. It should be noted that graphene G and 2D peak's position blue shift indicated the presence of the additional mechanical deformations (compression) of the graphene layer.

The results of our research are of the great interest from methodological point of view and can help one to characterize heterostructure on each stage of its assembly process.

Acknowledgements: the research was supported by BRFB grant no. F21RM-057, Research 2.14.3 «Chalcogenides, metal oxides and carbon based films for energy conversion» (SRP «Materials science, new materials and technologies» 2021-2025).

References

1. Komatsu K. et al. / Sci. Adv. 2018. T. 4, № 5. C. eaaq0194.
2. Wang L. et al. / Science. 2013. Vol. 342. №. 6158. P. 614-617.
3. Lee J.E. et al. / Nat. Commun. 2012. Vol. 3, № 1. P. 1-8.