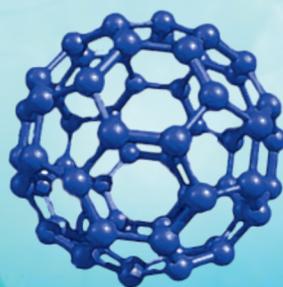


**НАНОТЕХНОЛОГИИ И НАНОМАТЕРИАЛЫ:  
СОВРЕМЕННОЕ СОСТОЯНИЕ  
И ПЕРСПЕКТИВЫ РАЗВИТИЯ**

**СБОРНИК ТЕЗИСОВ IV МЕЖДУНАРОДНОЙ  
НАУЧНО-ТЕХНИЧЕСКОЙ КОНФЕРЕНЦИИ**

г. Волгоград, 25–26 апреля 2024 г.



МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ  
РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ  
ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ АВТОНОМНОЕ  
ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ  
ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ  
«ВОЛГОГРАДСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»  
Институт приоритетных технологий

**НАНОТЕХНОЛОГИИ И НАНОМАТЕРИАЛЫ:  
СОВРЕМЕННОЕ СОСТОЯНИЕ  
И ПЕРСПЕКТИВЫ РАЗВИТИЯ**

**СБОРНИК ТЕЗИСОВ IV МЕЖДУНАРОДНОЙ  
НАУЧНО-ТЕХНИЧЕСКОЙ КОНФЕРЕНЦИИ**

*г. Волгоград, 25–26 апреля 2024 г.*

Волгоград  
Издательство Волгоградского государственного университета  
2024

- © Авторы статей, 2024
- © ФГАОУ ВО «Волгоградский государственный университет», 2024
- © Оформление, электронный текст. Издательство Волгоградского государственного университета, 2024

ISBN 978-5-9669-2356-3

УДК 620.3  
ББК 30.3  
Н25

**Редакционная коллегия:**

д-р физ.-мат. наук, проф. *И. В. Запороцкова* (отв. ред.);  
д-р физ.-мат. наук, доц. *С. В. Борознин*;  
д-р физ.-мат. наук, проф. *Н. П. Борознина* (отв. секретарь)

**Нанотехнологии** и наноматериалы: современное состояние и перспективы развития : сб. тез. IV Междунар. науч.-техн. конференции, г. Волгоград, 25–26 апр. 2024 г. / редкол.: И. В. Запороцкова (отв. ред.) [и др.] ; Федер. гос. авт. образоват. учреждение высш. образования «Волгогр. гос. ун-т». – Волгоград : Изд-во ВолГУ, 2024. – 1 файл (9,2 Мб) : 75 с. – Систем. требования: браузер Google Chrome (версия 109.0.5414.120) или аналогичный; скорость подключения к Интернету от 10 Мбит/с; дополнительно: Adobe Reader или Adobe Acrobat 8.0. – URL: <https://book.jvolsu.com/index.php/ru/component/attachments/download/1764>. – [Содержание : с. 72–74.](#) – Материалы предыдущих трех конф. опубл. в печ. виде. – ISBN 978-5-9669-2356-3. – Текст : электронный.

В данном сборнике представлены тезисы научных трудов IV Международной научно-технической конференции «Нанотехнологии и наноматериалы: Современное состояние и перспективы развития», состоявшейся 25–26 апреля 2024 года на базе Волгоградского государственного университета.

Электронная форма издания оптимизирует его использование в электронной научной среде.

Предназначен студентам, аспирантам, специализирующимся по направлениям «Нанотехнологии», «Физика конденсированных сред», «Химическая физика», «Физическая химия», а также ученым, специалистам, работающим в указанных направлениях.

**УДК 620.3**  
**ББК 30.3**

*Все права на размножение и распространение в любой форме остаются  
за организацией-разработчиком.*



## ОРГАНИЗАЦИОННЫЙ КОМИТЕТ КОНФЕРЕНЦИИ

### **Председатель оргкомитета:**

*Калинина Алла Эдуардовна* – ректор Волгоградского государственного университета, доктор экономических наук, профессор.

### **Заместитель председателя:**

*Дзедик Валентин Алексеевич* – первый проректор Волгоградского государственного университета, доктор экономических наук, доцент.

*Запороцкова Ирина Владимировна* – директор института приоритетных технологий Волгоградского государственного университета, доктор физико-математических наук, профессор.

### **Члены оргкомитета:**

*Сучков Сергей Германович* – директор научно-производственного центра Саратовского государственного университета, доктор физико-математических наук, профессор, старший научный сотрудник.

*Кожитов Лев Васильевич* – профессор кафедры технологии материалов электроники НИТУ «МИСиС», доктор технических наук, профессор.

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

*Двужилова Юлия Владимировна* – доцент кафедры судебной экспертизы и физического материаловедения Волгоградского государственного университета, кандидат физико-математических наук, доцент.

*Элбакян Лусине Самвеловна* – доцент кафедры судебной экспертизы и физического материаловедения Волгоградского государственного университета, кандидат физико-математических наук.

## Ударная деформация пучка УНТ. Компьютерный эксперимент

Андрухова О.В.<sup>1</sup>, Сафронов И.С.<sup>1</sup>, Ушаков А.И.<sup>1</sup>, Овчаров А.А., Дмитриев С.В.<sup>2</sup>

*e-mail: ova17@yandex.ru*

<sup>1</sup> ФГАОУ ВО «Университет науки и технологий МИСиС», Москва, Россия

<sup>2</sup> Институт проблем сверхпластичности металлов РАН, Уфа, Россия

В работе в рамках квазитрехмерного компьютерного эксперимента моделируется одноосное ударное сжатие пучка зигзагообразных УНТ равного диаметра в направлении перпендикулярном плотноупакованным слоям [1-3]. Трубки в пучке, выравнены в продольном направлении так, что в его поперечном сечении формируется треугольная решетка. В условиях плоской деформации атомы  $^{12}\text{C}$  подвижны в плоскости поперечного сечения пучка, и смещения атомов задаются двумя независимыми координатами  $x$  и  $y$ . Сдвиги атомов вдоль трубок отсутствуют, т.е. в продольных цепочках атомы жестко связаны. Нагруженное состояние характеризуется абсолютным значением деформации. Моделирование проводится методом возмущенно-релаксационной молекулярной динамики (МД ВР) при  $T=0\text{K}$  в рамках модели, описанной в [4, 5].

Расчетный блок выбирался в виде параллелограмма и содержал  $I \times J = 16 \times 16 = 256$  нанотрубок, были использованы периодические граничные условия. Число атомов углерода  $n$  в поперечном сечении зигзагообразной УНТ варьировалось, определяя жесткость одной трубки. Линейные размеры отдельных УНТ подобраны так, чтобы моделировать упругий демпфер пучка, при котором схлопнувшиеся при ударной нагрузке однослойные трубки могут открыться в процессе их последующей релаксации [3]. Диапазон деформации пучка подбирался так, чтобы исключить дегенеративное разрушение пучка УНТ, а при более низких нагрузках трубки не вели себя как абсолютно жесткие стержни.

Использовались следующие параметры модели [4,6]: равновесное межатомное расстояние в графене  $\rho = 1,418 \text{ \AA}$ ; равновесное расстояние между жесткими атомными рядами, ориентированными вдоль оси  $z$  –  $a = \rho\sqrt{3}/2 = 1,228 \text{ \AA}$ ; диаметр трубки  $D = 10,188 \text{ \AA}$ . Равновесное расстояние между стенками УНТ определялось в процессе атомной релаксации, при заданных параметрах пучка составило  $d = 3,088 \text{ \AA}$ . Число атомов  $n$  в сечении трубки варьировалось от 10 до 45 атомов, а относительная ударная деформация пучка - в интервале от 3% до 32%.

Влияние величины и характера внешней нагрузки на структуру пучка УНТ оценивается по картинкам смещения атомов в каждой отдельной трубке и геометрии пучка в целом - положению центров масс трубок и по степени эллиптичности, картам интенсивности сил и потенциальной энергии взаимодействия атомов в трубке и трубок между собой. Построены гистограммы распределения трубок по степени сжатия и графики зависимости от времени релаксации соответствующих параметров.

В эксперименте установлено, что характер атомной релаксации пучка УНТ, подвергнутого одноосной ударной деформации, существенно зависит от числа атомов в сечении отдельной трубки. При  $n < 12$  атомов трубки ведут себя как жесткие стержни вплоть до относительных деформаций порядка 28%, увеличение же числа атомов в трубке до значений больших 35 ведет к тому, что трубки теряют упругость и схлапываются с последующим дегенеративным разрушением уже при деформациях порядка 10,5%.

Для дальнейшего анализа влияния степени деформации на формирования структуры пучка УНТ  $n$  выбиралось равным 26.

В работе показано наличие нескольких точек (деформаций), при достижении которых наблюдается качественное изменение геометрии стенки УНТ и/или пучка в целом. Например, при относительных деформациях больших 15,6% при релаксации возникают периодически повторяющиеся локальные области с различной степенью эллиптичности трубок. Образование подобных структур можно интерпретировать как волны эллиптичности.

### **СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ**

1. Gupta, V.K., Kumar, R. Adsorptive removal of dyes from aqueous solutions onto carbon nanotubes: a review. *Adv. Colloid Interface Sci*, 2013, vol. 193, p. 24–34.
2. Dyachkov P.N. *Uglerodnye nanotrubki: stroenie, svojstva, primenenija* [Carbon Nanotubes: Structure, Properties, Applications]. Moscow, Binom Publ., 2006. 293 p.
3. Terrones, M. Science and technology of the twenty-first century: synthesis, properties, and applications of carbon nanotubes. *Annu. Rev. Mater. Res.*, 2003, vol. 33(1), pp. 419–501.
4. Korznikova, E.A., Rysaeva, L.K., Savin, A.V., et.al. Chain model for carbon nanotube bundle under plane strain conditions, *Materials*, 2019, vol 12(23), pp. 3951-3960.
5. Savin, A.V.; Korznikova, E.A.; Dmitriev, S.V. Scroll configurations of carbon nanoribbons. *Phys. Rev. B*, 2015, vol. 92, 035412.
6. Moradi, Omid, et al. Application of Carbon Nanotubes in Nanomedicine: New Medical Approach for Tomorrow. [Handbook of Research on Diverse Applications of Nanotechnology in Biomedicine, Chemistry, and Engineering, edited by Shivani Soni, et al.], *IGI Global*, 2015, pp. 90-128.

# Комбинированный платино-углеродный электрокатализатор для водородо-воздушных топливных элементов

Астравух Я.В.<sup>1,2</sup>, Павлец А.С.<sup>1,2</sup>, Алексеенко А.А.<sup>1,2</sup>

e-mail: yanaast19@yandex.ru

<sup>1</sup>Южный федеральный университет, химический факультет, Ростов-на-Дону, Россия

<sup>2</sup>ООО «ПРОМЕТЕЙ РД», Ростов-на-Дону, Россия

Ключевыми компонентами топливного элемента с протонообменной мембраной (ТЭПОМ) являются пористые каталитические слои, содержащие электрокатализатор, в котором наночастицы (НЧ) платины и ее сплавов с другими металлами распределены по поверхности углеродного носителя [1]. Платиновые наночастицы обеспечивают каталитическое протекание токообразующих реакций – электроокисления водорода и электровосстановления кислорода (РВК). В то же время углерод является подложкой, способной адсорбировать НЧ платины и проводить электрический ток, что является необходимым условием для протекания электрохимических процессов в катодных и анодных пространствах мембранно-электродного блока с целью получения электроэнергии и воды из водорода и кислорода. В качестве углеродного носителя могут использоваться относительно недорогие сажи типа Vulcan и Ketjenblack, имеющие высокие параметры удельной площади поверхности, оптимальную пористость и гидрофильные/гидрофобные свойства [2].

Высокие функциональные характеристики электрокатализаторов обеспечивают большую мощность и продолжительность работы ТЭПОМ. Особо значимыми характеристиками таких материалов являются высокая активность в РВК, площадь электрохимически активной поверхности (ЭХАП) и высокая стабильность в ходе работы ТЭПОМ [1]. Добиться сочетания высоких значений данных параметров в одном катализаторе является сложной задачей, требующей понимания структурно-морфологических характеристик платиносодержащих электрокатализаторов. К примеру, Pt/C материал, характеризующийся невысокой массовой долей платины (до 20%) и малым размером НЧ (до 2 нм) проявляет повышенную каталитическую активность (рис. 1) [3]. Однако, такой катализатор в большей степени подвержен деградации. Катализаторы, имеющие в своем составе преимущественно крупные частицы, напротив, характеризуются повышенной стабильностью, но, как правило, недостаточной активностью в РВК [3].

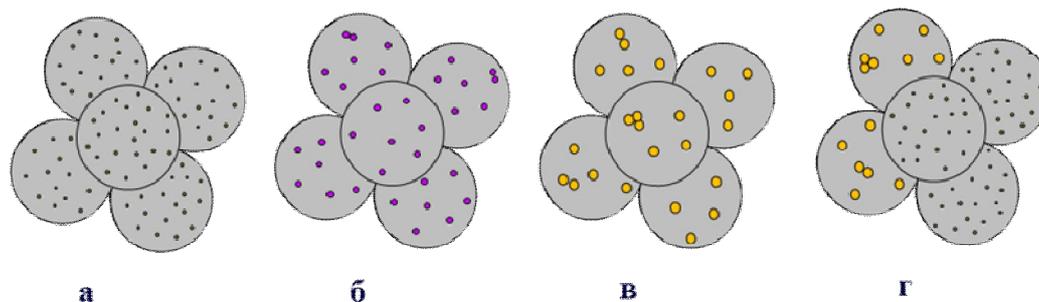


Рис. 1. Схематичное изображение поверхности электрокатализаторов марки РМ и микс-образца: РМ20 (а), РМ40 (б), РМ60 (в) и mix-40 (г). Серым цветом обозначены микросферы углерода, цветные области – НЧ Pt

Перспективным решением в области водородной энергетики является разработка новых и усовершенствование существующих электрокатализаторов. В связи с этим перспективным методом получения высокоэффективных платиносодержащих электрокатализаторов является создание микс-материалов путем механического смешения готовых катализаторов с различной загрузкой платины. Предполагается, что отличные по структурным параметрам (массовая доля платины, средний размер НЧ, равномерность пространственного распределения НЧ по поверхности углеродного носителя) материалы образуют продукт, сочетающий в себе повышенную активность и стабильность по сравнению с катализатором с близкой загрузкой платины, но полученным другим методом.

В работе исследуется линейка Pt/C электрокатализаторов марки РМ (ООО «Прометей РД») с загрузкой платины 20, 40 и 60% (РМ20, РМ40 и РМ60 соответственно), а также микс-образца, полученного при смешивании равных количеств РМ20 и РМ60 с целью получения 40%-го продукта (рис. 2).

Установлено, что микс-катализатор обладает более высокими значениями активности в РВК и стабильностью, по сравнению с РМ40, благодаря вкладу двух, различных по характеристикам, материалов, образующих новый, превосходящий по электрохимическим параметрам своих предшественников, продукт (рис. 2). Таким образом, предложенный способ получения Pt/C электрокатализатора может быть перспективным для коммерческого производства.

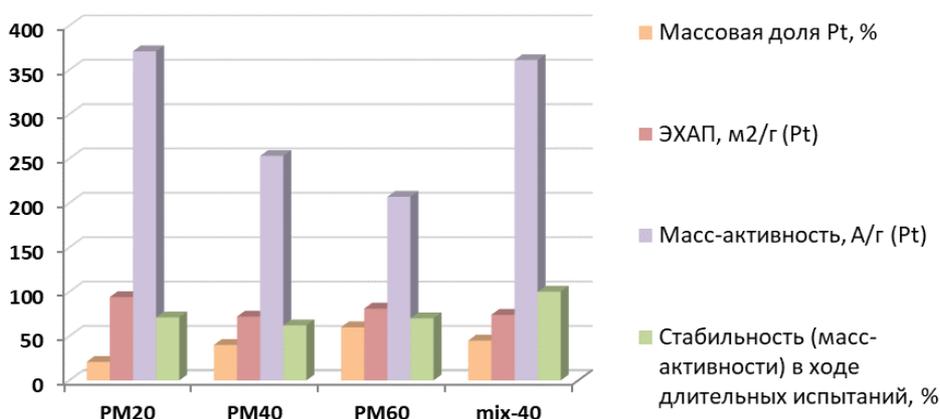


Рис. 2. Структурные и электрохимические характеристики Pt/C катализаторов

**Финансирование:** исследование выполнено при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования РФ в рамках государственного задания в сфере научной деятельности № FENW-2023-0016.

### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Paperzh K.O., Pavlets A.S., Alekseenko A.A. et al. The integrated study of the morphology and the electrochemical behavior of Pt-based ORR electrocatalysts during the stress testing. *International Journal of Hydrogen Energy*, 2023, vol. 48, pp. 22401-22414.
2. Alekseenko A.A., Pavlets A.S., Belenov S.V. et al. The electrochemical activation mode as a way to exceptional ORR performance of nanostructured PtCu/C materials. *Applied Surface Science*, 2022, vol. 595, pp. 153533.
3. Josef C. Meier, Carolina Galeano, Ioannis Katsounaros et al. Design criteria for stable Pt/C fuel cell catalysts. *Beilstein J. Nanotechnol*, 2014, vol. 5, pp. 44–67.

## Изучение сорбционного взаимодействия углеродных нанотрубок с продуктами выстрела пороха

Ермакова Т.А.<sup>1</sup>, Васильев В.А.<sup>2</sup>, Какорина О.А.<sup>1</sup>, Запороцкова И.В.<sup>1</sup>,  
Боковиков Д.О.<sup>1</sup>

e-mail: nmtb-201\_398218@volsu.ru

<sup>1</sup>ФГАОУ ВО «Волгоградский государственный университет», Волгоград, Россия

<sup>2</sup>Волгоградская академия МВД России, Волгоград, Россия

Высокоразвитая поверхностная структура углеродных нанотрубок позволяет их использовать в маркировке пороха и установления определенного вида боеприпаса. Ранее был разработан способ маркировки пороха углеродными нанотрубками [1]. При исследовании методом микроскопии следов продуктов сгорания пороха и углеродного нанотрубного материала были выявлены разнообразные агломераты на поверхности углеродных нанотрубок [2, 3]. На рисунке 1 представлены результаты взаимодействия углеродных нанотрубок с продуктами сгорания бездымного пороха, которые были собраны с тканей – мишеней и исследовались на растровом электронном микроскопе (РЭМ). На рисунке 1а отчетливо видны продолговатые структуры в форме «червей», переплетенные между собой и преимущественно цилиндрической формы, что свидетельствует о наличии углеродных нанотрубок в продуктах сгорания бездымного пороха, полученных в режиме вторичных электронов (SE). Так же на изображении можно увидеть трех- и двухкомпонентные характерные частицы металлов округлой формы, которые более заметны в режиме отраженных электронов (BSE) (рис. 1б).

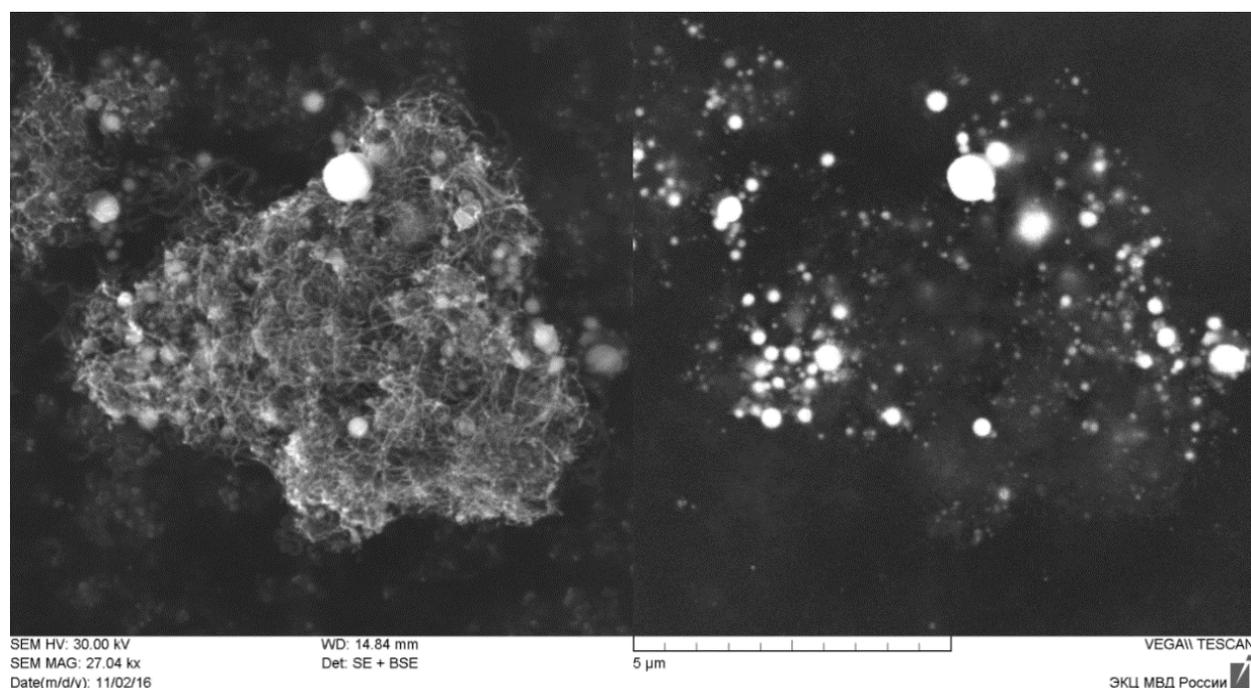


Рис. 1. РЭМ изображения модифицированных углеродных нанотрубок и частиц следов продуктов выстрела, полученных при увеличении 5 мкм:  
а) режим вторичных электронов (SE); б) режим отраженных электронов (BSE)

При изучении механизма сорбции алюминия, свинца и сурьмы на поверхности углеродных нанотрубок типа «arm-chair» (6,6), «chiral» (3,6) и «zig-zag» (0,10) с различными краевыми модификациями определены основные параметры процессы адсорбции [4]. В продолжении данной работы были проведены расчеты в рамках модели молекулярного кластера для других металлов, входящих в состав продуктов выстрела, таких как олово, железо, медь, магний. Исследование в работе проводилось с использованием полуэмпирической расчётной схемы РМ6 для изучения процессов адсорбции продуктов выстрела на однослойных УНТ. Выбор данного метода обусловлен его высокой эффективностью для современных вычислительных систем. Анализ энергетических кривых установил, что во всех случаях наблюдается как физическая, так и химическая адсорбция данных атомов на поверхности углеродных нанотрубок.

Таки образом, полученные результаты исследования процесса сорбции продуктов выстрела бездымного пороха с углеродными нанотрубками подтвердили полученный ранее экспериментальный материал.

### **СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ**

1. Ермакова Т.А., Запороцкова И.В., Латышов И.В., Афанасьев И.Б., Дружинин Ю.А., Юдина Т.Ю. Патент RU 2625462, 2017.
2. Афанасьев И.Б., Дружинин Ю.А., Ермакова Т.А., Запороцкова И.В., Латышов И.В. Использование модельных смесей, содержащих углеродные нанотрубки, в криминалистических исследованиях. *Вестн. Волгогр. гос. ун-та. Сер. 10, Иннов. деят.*, Т. 11 № 2, с. 46–53.
3. Латышов И.В., Васильев В.А., Запороцкова И.В., Ермакова Т.А., Афанасьев И.Б., Дружинин Ю.А. Возможности использования углеродного нанотрубного материала при производстве криминалистических экспертных исследований следов выстрела. [Судебная экспертиза: российский и международный опыт: материалы IV Междунар. науч.-практ. конф. Волгоград: ВА МВД России], 2018. с. 104–106.
4. Ермакова Т.А., Какорина О.А., Назаренко А.К., В.А. Васильев. Исследование процесса адсорбции продуктов выстрела на поверхности углеродной нанотрубки / *XXI Менделеевский съезд по общей и прикладной химии: тез. докл.* Санкт-Петербург, 2019 г. с. 211.

## Особенности процесса получения мезофазных пеков из нефтяного и каменноугольного сырья

Гончарова Н.Н.<sup>1</sup>, Будник Д.А.<sup>1</sup>, Будушин Д.А.<sup>1</sup>, Тарасов К.А.<sup>1</sup>, Самойлов В.М.<sup>1</sup>

e-mail: [budushin.dima@yandex.ru](mailto:budushin.dima@yandex.ru)

<sup>1</sup>Госкорпорация «Росатом» акционерное общество «Научно-исследовательский институт конструкционных материалов на основе графита «НИИГрафит», Москва, Россия

Для высокотехнологичных областей особую ценность представляют мезофазные пеки (МФП), используемые главным образом для получения углеродных волокон (УВ) и изделий на их основе. Пековые углеродные волокна, полученные из МФП имеют наноструктурированную кристаллическую решётку, поэтому имеют уникальные свойства и превосходят другие виды УВ благодаря повышенным значениям модуля Юнга от 600 до 1000 ГПа и теплопроводности от 600 до 1100 Вт/м·К (при 300 К). Сырьем для получения МФП обычно являются нефтяные, каменноугольные и нафталиновые пеки. Подходящее сырье должно содержать полиароматические молекулы с семью и более полисопряженными циклами [1–2].

Высокая вязкость сырьевого пека, наряду с наличием нерастворимых в хинолине или пиридине  $\alpha_1$ -фракция (карбоиды, частицы сажи и т.д.), затрудняет образование мезофазы и ограничивает возможности формования волокна из такого пека. В связи с этим существует потребность в разработке технологий получения изотропного пека, очищенного от присутствия нерастворимых включений или способов модификации традиционного каменноугольного пека с целью удаления таких карбоидных фаз.

Целью работы является отработка процесса получения МФП из нефтяного и каменноугольного сырья.

В качестве исходного сырья для получения МФП использовались каменноугольная смола и тяжелые фракции нефтепереработки. Нами была принята трёхстадийная схема переработки исходного сырья. Сырье первоначально проходило отгонку для получения фракций свободных от присутствия  $\alpha_1$ -фракций, после чего проводили процесс синтеза изотропного пека. При повышенном давлении и температурах порядка 400–450 С происходило формирование мезофазы. После мы повторно отгоняем полученное сырье для избавления от лишних примесей. Совместно с отгонкой проводим термообработку для увеличения размеров сферолитов.



Рис. 1. Технологическая схема переработки нефтяного и каменноугольного сырья в МФП

Из полученных МФП были изготовлены микрошлифы, после чего, исследовали оптическую текстуру МФП в поляризованном свете с помощью микроскопа Микромед ПОЛАР 3.

На рисунках ниже приведены микрофотографии МФП из различного вида сырья, на которых видны различия в форме и размерах жидкокристаллических образований (мезофазы). Согласно полученным результатам, в зависимости от вида используемого сырья наблюдается различие в структуре и размерах сферолитов мезофазы в полученных МФП.

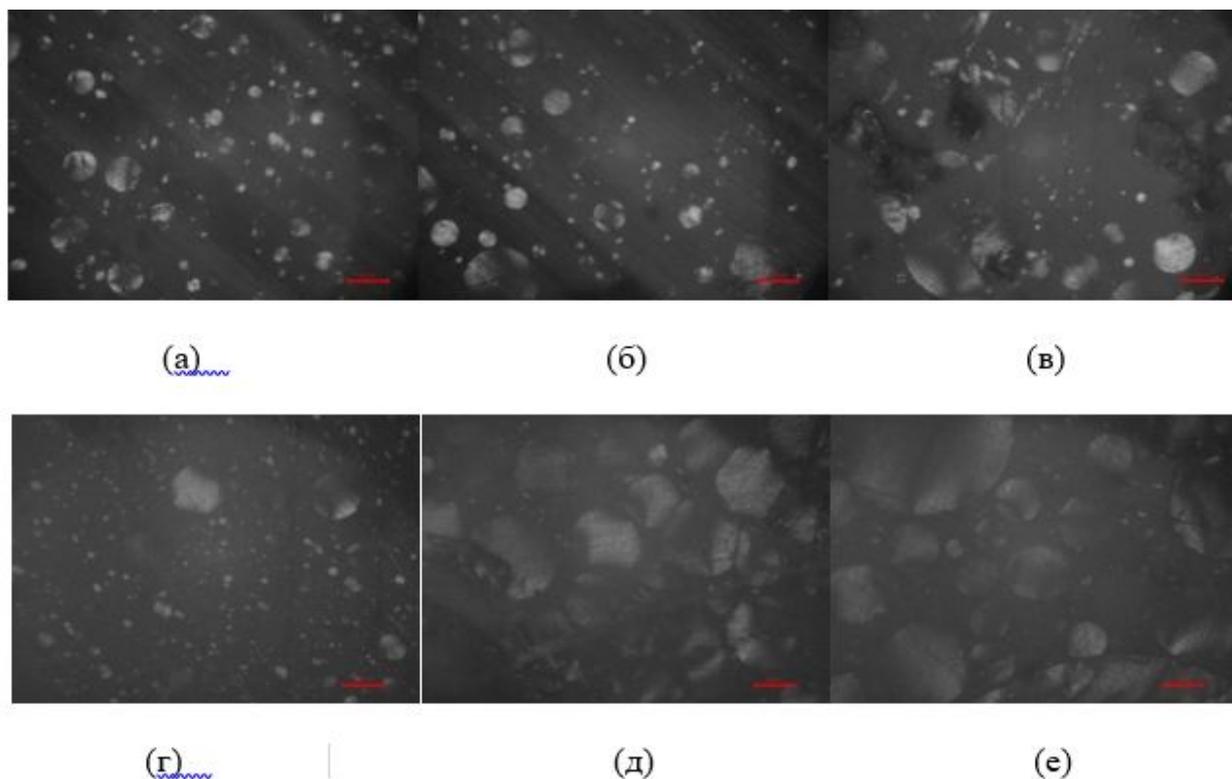


Рис. 2. Микрофотографии МФП:

- а) из каменноугольной смолы без коалесценции с небольшими сферолитами; б) из каменноугольной смолы с небольшими сферолитами; в) из каменноугольной смолы со средними сферолитами и с присутствием коалесценции; г) из тяжелых фракций нефтяных продуктов без коалесценции с небольшими сферолитами; д) из тяжелых фракций нефтяных продуктов со средними сферолитами и наличием коалесценции; е) из тяжелых фракций нефтяных продуктов со средними сферолитами без коалесценции

#### **Заключение:**

1. Изучение влияния сырья на оптическую текстуру позволяет оптимизировать процесс формирования структуры МФП и повысить его качество. Кроме того, анализ сферолитов МФП может быть использован для контроля и оценки процессов синтеза и технологических параметров производства данного материала.

2. Тип исходного сырья сильно влияет на размеры и форму на оптическую текстуру МФП. У МФП, полученного из каменноугольной смолы – сферолиты имеют маленький размер и достаточно сильно удалены друг от друга, но при этом достаточно редко встречается коалесценция. У МФП, полученного из тяжелых фракций нефтяных продуктов – сферолиты имеют в разы большие размеры и близко расположены друг к другу, но в данном случае коалесценция образуется чаще.

#### **СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ**

1. Набиуллина Э.Р. Хроматография нефтяных пеков и их структурно-групповой состав. Дис. к.х.н. Уфа: Башкир. гос. ун-т. 1990. 152 с.
2. Валинурова Э.Р., Кудашева Ф.Х. Структурно-групповой состав волокнообразующих нефтяных пеков. *Химия и химическая технология*, 2015, Т. 58 В. 7, с. 62–65.

## Неупорядоченные углеродные нанотрубки и полимеры

Веревкина К.Ю.<sup>1</sup>, Борознина Н.П.<sup>1</sup>

e-mail: verevkina@volsu.ru

<sup>1</sup>ФГАОУ ВО «Волгоградский государственный университет», Волгоград, Россия

В работе представлены результаты численного моделирования динамики мощного лазерного импульса, фемтосекундной длительности, в среде на основе полупроводниковых углеродных нанотрубок и полимера. Установлено квазиустойчивое распространение импульса в такой среде. Анализ проводился путем изменения параметров концентрации полимера в композитной среде, чтобы изучить влияние полимера на динамику ультракороткого импульса.

Известно, что солитоны представляют собой особые моды, возникающие в дисперсионных нелинейных средах [1–2]. Эти среды включают такие системы, как конденсаты Бозе-Эйнштейна, оптические волноводы и системы углеродных нанотрубок [3–5]. Особый интерес вызывает система углеродных нанотрубок, где рассматривался случай равномерного распределения нанотрубок по всему объему образца. Важно отметить, что для системы углеродных нанотрубок было получено обобщенное уравнение, которое является расширением нелинейного уравнения Шредингера. Это уравнение играет значительную роль в понимании свойств и динамики солитонов в такой системе.

Нелинейные уравнения Шредингера (НУШ) с фокусирующей или дефокусирующей нелинейностью являются универсальными моделями, позволяющими описывать различные типы солитонов. Однако, в условиях пространственной неоднородности солитоны могут приобретать новые свойства и разнообразие солитонных структур может значительно расширяться [6].

Ласкин предложил расширение нелинейных уравнений Шредингера в своей работе [8], включающее в себя дробное уравнение Шредингера. Это обобщение предполагает замену второго порядка дифференциального слагаемого на дробную производную, порядок которой находится в интервале от 1 до 2. Когда порядок дробной производной равен 2, это соответствует полностью упорядоченной среде.

Основной полученный результат представлен на рисунке ниже:

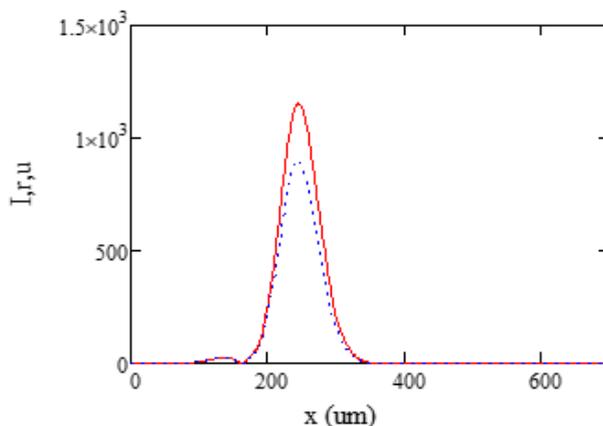


Рис. 1. Сплошная кривая  $\alpha = 1.6$ , штриховая кривая  $\alpha = 1.5$ .  $I$  – интенсивность выражена в относительных единицах. Полимера в два раза больше чем УНТ

Концентрация полимеров оказывает слабое влияние, а амплитуду импульса, связано с тем, что форма импульса определена в основном порядком дробной производной и нелинейными свойствами углеродных нанотрубок.

**Финансирование:** Работа проводилась в рамках государственного задания Министерства науки и высшего образования РФ (тема «FZUU-2023-0001»).

### **СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ**

1. Dvuzhilova Yu.V., Dvuzhilov I.S., Belonenko M.B. Super-powerful laser pulses in a photon crystal with carbon nanotubes and polymer. *Izv. of the Rus. Ac. of Scien.* 2022. Т. 86, No. 11. Pp. 1606-1610.
2. Zakharov V.E., Manakov S.V., Novikov S.P., Pitaevskii L.P. *Theory of Solitons: Inverse Scattering Transform.* Nauka publishers, Moscow.1980.
3. Strecker K.E., Partridge G.B., Truscott A.G., Hulet R.G. Bright matter wave solitons in Bose-Einstein condensates. *New J. Phys.* 2003. V. 5. P. 73.1-73.8.
4. Abdullaev F.Kh., Gammal A.G., Kamchatnov A.M., Tomio L. Dynamics of bright matter wave solitons in a Bose-Einstein condensate. *Int. J. Mod. Phys.* 2005. V. 19. Pp. 3415-3473.
5. Bagnato V.S., Frantzeskakis D.J., Kevrekidis P.G., Malomed B.A., Mihalache D. Bose-Einstein condensation: Twenty years after. *Rom. Rep. Phys.* 2015. V. 67. Pp. 5-50.
6. Kartashov Y.V., Astrakharchik G.E., Malomed B.A., Torner L. Frontiers in multidimensional self-trapping of nonlinear fields and matter. *Nat. Rev. Phys.* 2019. V. 1. Pp. 185-197.

## **Азот-углеродные нанотрубки: обзор последних достижений в синтезе**

*Григорьев А.Д.<sup>1</sup>, Борознина Н.П.<sup>1</sup>, Борознин С.В.<sup>1</sup>, Запороцкова И.В.<sup>1</sup>*

*e-mail: Nim-221\_827826*

*<sup>1</sup>ФГАОУ ВО «Волгоградский государственный университет», Волгоград, Россия*

Среди разнообразных наноструктур из графитового нитрида углерода (CN) нанотрубки CN в настоящее время привлекают все больший интерес благодаря привлекательным свойствам CN и геометрическим преимуществам одномерных нанотрубок. В этом обзоре обсуждаются функциональные преимущества УНТ и недавний прогресс в синтезе УНТ на основе прекурсоров. Кроме того, рассмотрены будущие задачи и возможности наноструктур на основе CNNT. В связи с быстрым развитием материаловедения и технологий необходимо прилагать больше усилий для продвижения передовых функциональных возможностей и перспективных применений материалов на основе CNNT.

Нанотрубки обладают уникальными наноструктурами с новыми свойствами, а также улучшенной теплопроводностью; Кроме того, эти характеристики зависят от геометрии и дефектов трубок [1, 2]. Хотя углерод по-прежнему остается основным материалом для нанотрубок, были проведены многочисленные работы по получению нанотрубок, состоящих из других материалов.

Морфология трубок (длина, диаметр и однородность) и состав CNNT определяются выбором прекурсоров, методами синтеза и параметрами реакции.

При использовании газовых смесей в качестве исходных материалов двумя основными методами получения CNNT являются метод твердой матрицы и магнетронное распыление. В методе нанесения на твердую матрицу обработка газовых смесей химическим осаждением из газовой фазы (CVD) (например, газов C<sub>2</sub>H<sub>2</sub>-N<sub>2</sub> или газовой смеси N<sub>2</sub>-H<sub>2</sub>-CH<sub>4</sub>) позволяет наносить слои покрытия CN на твердую матрицу с последующим удалением матрицы. Группа Shih использовала эту стратегию для подготовки CNNT, которая может стать первым отчетом о CNNT [3]. В их исследовании в качестве матрицы использовалась мембрана из оксида алюминия, а в качестве прекурсора – газовая смесь C<sub>2</sub>H<sub>2</sub> и N<sub>2</sub>. Был получен пучок прямых CNNT диаметром 250 нм и длиной в несколько микрометров (рис. 1d и e). На рис. 1 а и b показан процесс формирования CNNT. Следует отметить, что смещение постоянного тока играет ключевую роль в формировании CNNT. В отсутствие постоянного смещения синтез происходит только на верхней поверхности матрицы, что не позволяет достичь трехмерной морфологии (рис. 1c) [4].

Другим методом синтеза CNNT из газов является технология магнетронного распыления. [7] Suenaga и его коллеги вырастили прямые CNNT на подложках из хлорида натрия путем магнетронного распыления графитовой мишени в смеси газов Ar и N<sub>2</sub> (рис. 1h). Несмотря на то, что синтезированные CNNT хорошо выровнены, их размеры неоднородны: диаметр составляет 10-50 нм, а длина – приблизительно 50 нм (рис. 1f и g). Кроме того, кристалличность и оптические свойства были неудовлетворительными. Атомное соотношение N/C в полученном наноматериале было ниже идеального состава 4:3, и были обнаружены некоторые примеси кислорода.

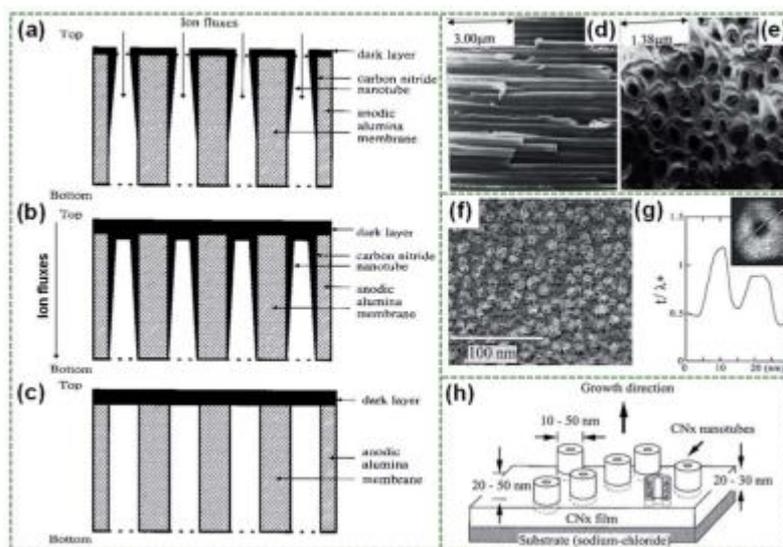


Рис. 1. Схема формирования CNNT на матрице из анодного оксида алюминия на более ранних (а) и более поздних (б) стадиях при смещении постоянного тока и на любой стадии при отсутствии смещения постоянного тока к подложке (в). Вид сбоку на СЭМ-изображения нанотрубок, полученных с помощью системы ECR-CVD (d), и нанотрубок, только что появившихся из шаблона (е). Кольцевое изображение CNNT в темном поле (f), профиль толщины трубки (g) и схема CNNT, выращенных на подложке (h)

Когда в качестве основного исходного материала используется хлор-1,3,5-триазин, химический способ сборки заключается в сольвотермической обработке растворителями бензол/циклогексан. Guo и др. сообщает о простом бензольно-термическом процессе, включающем сольвотермическую реакцию  $C_3N_3Cl_3$ ,  $NaN_3$  и бензола с последующим добавлением газа  $NaCl_2$  и  $N_2$  (рис. 2а). Синтезированные нанотрубки имеют внутренний диаметр 50–100 нм и толщину стенки 20–50 нм; однако концы нанотрубок не открыты. В отличие от этого, Guo и др. циклогексан заменили бензолом в качестве растворителя путем сольвотермической обработки под давлением 1,8 МПа [5–7]. Полученные CNNT имели диаметр от 50 до 100 нм при длине в несколько микрометров или даже больше (рис. 2б). Испытанное атомное соотношение N/C для CNNT очень близко к 1:1. Интересно, что CNNT, полученные этим методом, имеют открытые концы, что указывает на важность растворителей для связности пор.

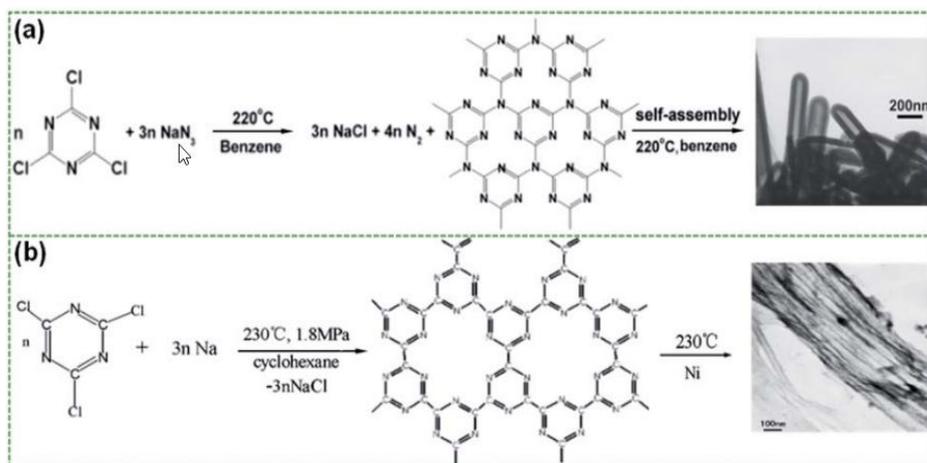


Рис. 2. Иллюстрация процесса синтеза УНТ с помощью термической обработки бензолом (а) Получение УНТ с использованием циклогексан-сольвотермического метода (б)

Меламин является одним из наиболее часто используемых прекурсоров для синтеза CNNT. Как и в случае с газообразным прекурсором, метод твердой матрицы также применим к меламину. Wang и др. сообщают о простом процессе обжига для получения нанотрубок на основе меламин с использованием самоподдерживающегося газа  $\text{NH}_3$  в отсутствие вспомогательных добавок [8]. Перед процессом обжига меламин был упакован в умеренной степени (рис. 3а(I)). При пиролизе промежуточного продукта листы CN сворачивались в трубчатые структуры (рис. 3а(II)). Как следствие, CNNT были успешно изготовлены путем прокатки листов CN с помощью потока  $\text{NH}_3$  (рис. 3а(III)). Синтезированные CNNT имеют трубчатую морфологию со средним диаметром около 80 нм, и они хорошо организованы с длиной даже более 10 мм. Кроме того, согласно элементному анализу, атомное соотношение N/C составляет около 1,26, что близко к стехиометрии CN.

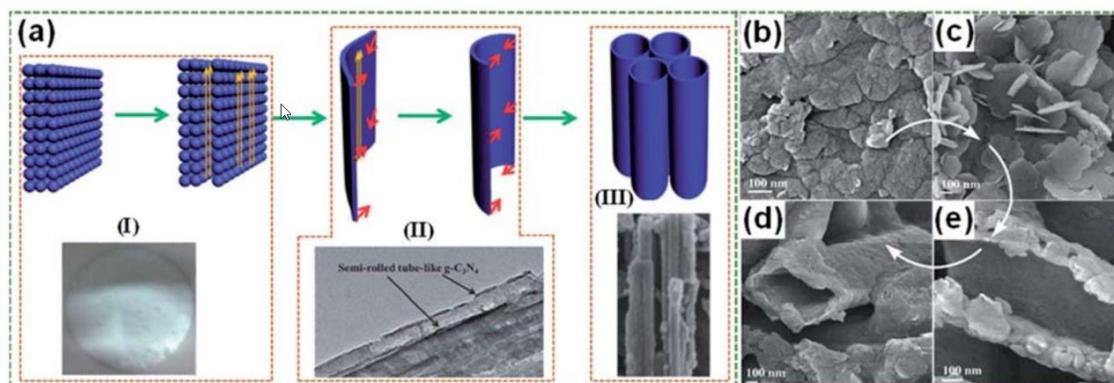


Рис. 3. Предложенный способ формирования CNNT с использованием механизма свертывания с помощью  $\text{NH}_3$  (а). Изображения, полученные методом полевой-эмиссионной сканирующей электронной микроскопии, демонстрируют морфологическую эволюцию от объемной слоистой структуры к нанотрубке: объемная CN (b), нанолисты CN (c), наполовину свернутый нанолист (d) и полностью свернутая нанотрубка (e)

Сообщалось, что для синтеза CNNT с использованием того же механизма используется метод морфологической трансформации, вызванный водой, который включает в себя четыре основных этапа: (1) прокаливание меламин, (2) отслаивание основной массы CN, (3) нагрев нанолистов CN и (4) охлаждение в холодной воде горячих нанолистов CN [8]. Холодная вода играет важную роль в обжати нанолистов CN из-за плохой теплопроводности при резком переходе от горячего к холодному. В другом исследовании Huang и др. разработали технологию, основанную на нагревании прекурсоров для перекристаллизации нанолистов CN из смеси  $\text{H}_2\text{SO}_4$ /метанола. Раствор  $\text{H}_2\text{SO}_4$ /метанол может привести к образованию большого количества пор в CNNT, что обеспечивает ускоренный массообмен наноматериала и улучшенную диффузию реагентов. Полученные CNNT обладают большой удельной площадью поверхности –  $117,7 \text{ м}^2 \text{ г}^{-1}$ . Кроме того, было проверено, что атомное соотношение C/N составляет 0,68, что приблизительно соответствует стехиометрии CN. Однако размеры нанотрубок неоднородны, а их длина составляет около нескольких микрометров.

Zhang и др. обнаружили, что меламин можно сначала обработать с помощью гидротермальной реакции с образованием микроструктуры комплекса MCA (рис. 4а). После термической поликонденсации эти микростержни были преобразованы в CN-

микротрубочки диаметром 1–2 мкм и длиной в несколько микрометров [8]. В другом исследовании Gao и др. сообщают о простом методе получения CNNT на основе триамина путем последующей обработки меламинам. Элементный анализ показал, что CNNT на основе триамина обладают атомным соотношением C/N, равным 3: 4,82, что близко к теоретическому значению CN. Вкратце, процесс синтеза проходил в четыре этапа: (1) растворение меламина в этиленгликоле, (2) добавление водного раствора азотной кислоты, (3) промывка образовавшегося белого осадка и (4) отжиг белого осадка с получением CNNT. Механизм образования (как показано на рис. 4b) основан на самосборке протонированного меламина в 1D волокнах, которая представляет собой процесс, опосредованный растворителем. Для метода последующего синтеза с использованием меламина в качестве исходного материала размеры нанотрубок определялись с помощью промежуточных элементов, таких как наноленты CN и наностержни МСА; поэтому размеры полученных CNNT обычно не поддаются контролю.

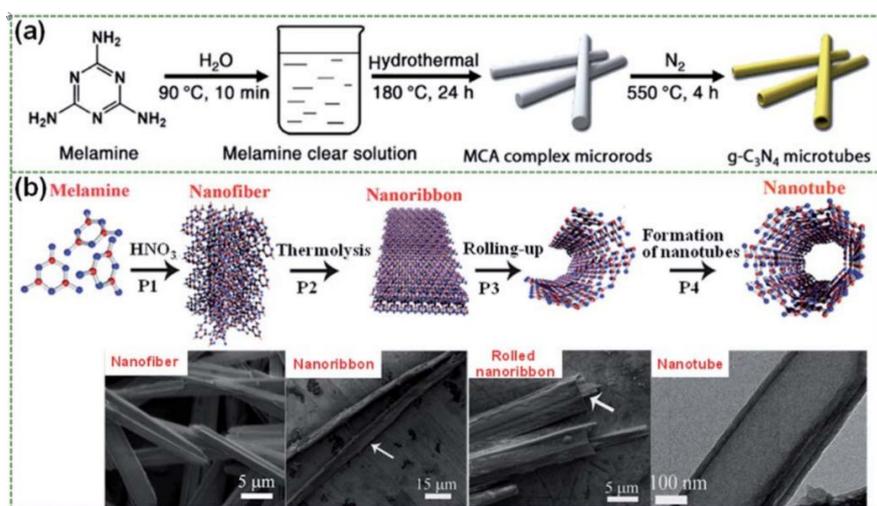


Рис. 4. Путь синтеза микротрубочек CNNT методом гидротермального пиролиза (а).  
Схема механизма образования CNNT, основанная на самосборке одномерных нановолокон (б)

### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Iijima, S. Helical microtubules of graphitic carbon. *Nature*, 1991, vol. 354(6348), 56-58.
2. Yan, Y., Miao, J., Yang, Z., Xiao, F.-X., Yang, H. B., Liu, B., & Yang, Y. Carbon nanotube catalysts: recent advances in synthesis, characterization and applications. *Chemical Society Reviews*, 2015, vol. 44(10), 3295–3346.
3. Roy, P., Berger, S., & Schmuki, P. TiO<sub>2</sub> Nanotubes: *Synthesis and Applications*. *Angewandte Chemie International Edition*, 2011, vol. 50(13), 2904–2939.
4. Sung, S.L., Tsai, S.H., Liu, X.W., & Shih, H.C. A novel form of carbon nitrides: Well-aligned carbon nitride nanotubes and their characterization. *Journal of Materials Research*, 2000, vol. 15, 502-510.
5. Huang, F., Cao, C. & Zhu, H. Catalytic self-assembly preparation and characterization of carbon nitride nano-tubes by a solvothermal method. *Chinese Science Bulletin*, 2005, vol. 50, pp. 626–629.

6. Hao, Q., Jia, G., Wei, W. et al. Graphitic carbon nitride with different dimensionalities for energy and environmental applications. *Nano Research*. 2020, vol. 13, pp. 37.
7. J. Bai, X., Pan, K., Qu, Y. et al. One-dimension carbon self-doping g-C<sub>3</sub>N<sub>4</sub> nanotubes: Synthesis and application in dye-sensitized solar cells. *Nano Research*. 2018, vol. 11, pp. 1322–1330.
8. Wang, X., Zhou, C., Shi, R. et al. Supramolecular precursor strategy for the synthesis of holey graphitic carbon nitride nanotubes with enhanced photocatalytic hydrogen evolution performance. *Nano Research*. 2019, vol. 12, pp. 2385–2389.

# Взаимодействие фотонного кристалла на основе примесных углеродных нанотрубок с мощным оптическим излучением

Двужилова Ю.В.<sup>1</sup>, Двужилов И.С.<sup>1</sup>

e-mail: nevzorkina@yandex.ru

<sup>1</sup>ФГАОУ ВО «Волгоградский государственный университет», Волгоград, Россия

В настоящей работе рассмотрена динамика мощного оптического излучения в среде с пространственно переменным показателем преломления (фотонном кристалле) на основе примесных углеродных нанотрубок. Произведен учет переходов между примесными уровнями в углеродных нанотрубках.

В последнее время профиль исследований учёных нелинейной оптики направлен на изучение вопроса распространения солитоноподобных импульсов в искусственно смоделированных средах с пространственно переменным показателем преломления, например, фотонном кристалле. Фотонный кристалл характеризуется наличием фотонной запрещенной зоны, таким образом, его можно использовать в качестве оптического фильтра. В качестве материала фотонного кристалла можно использовать полупроводниковые углеродные нанотрубки (УНТ), которые обладают уникальными физико-химическими свойствами [1, 2].

В данной работе мы рассматривали неидеальный фотонный кристалл для приближения к реальным условиям, а также для возможности дальнейшего использования данной работы в наукоемком производстве и в научных экспериментах. Неидеальность фотонного кристалла обусловлена наличием многоуровневой примеси в структуре углеродных нанотрубок. Такие примеси способны оказывать существенное влияние на электронную структуру вещества и тем самым вызывать изменения свойств полупроводников. Такие примеси способны оказывать существенное влияние на электронную структуру вещества и тем самым вызывать изменения свойств полупроводников [3].

В результате проведение численного моделирования оптического излучения в среде фотонного кристалла на основе примесных нанотрубок удалось установить, что влияние параметра многоуровневой примеси, связанного с интегралами перескока между примесными уровнями и зоной проводимости нанотрубок, сводится к стабилизации формы оптического импульса и влиянию на скорость фотоионизации в среде.

**Финансирование:** Работа выполнена в рамках государственного задания Министерства науки и высшего образования и науки РФ (тема “FZUU-2023-0001”).

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Нанотехнология в ближайшем десятилетии. Прогноз направления исследований.* под ред. М.К. Рокко, Р.С. Уильямс, П. Аливисатос. Мир. М. 2002. 356 с.
2. П. Харрис. *Углеродные нанотрубы и родственные структуры. Новые материалы XXI века.* М. Техносфера, 2003. 336с.
3. Mantsevich V. N. Different behaviour of local tunneling conductivity for deep and shallow impurities due to Coulomb interaction. *Solid State Commun.* 2010. V. 150. P. 2072-2075.

# DFT моделирование структуры и свойств муаровых Н/Ф диаманов

Демин В.А.<sup>1</sup>, Квашнин Д.Г.<sup>1</sup>, Чернозатонский Л.А.<sup>1</sup>

e-mail: victordemin88@gmail.com

<sup>1</sup>ФГБУН Институт биохимической физики им. Н.М. Эмануэля Российской академии наук, Москва, Россия

Покрытие поверхностей бислойного графена легкими атомами приводит к образованию межслоевых ковалентных связей. Полученная таким образом двумерная алмазоподобная структура называется «диаман» [1]. Диаманы и диаманоподобные материалы обладают широким спектром свойств, существенно зависящим от структуры исходного бислоя и покрытия поверхностей [2].

В данной работе будут представлены результаты DFT моделирования гидрированных/фторированных диаманов, основой которых является муаровый биграфен. Для расчетов были выбраны периодические структуры, имеющие наименьшие расчетные ячейки  $C_{28}$  и  $C_{52}$ , соответствующие углам свертки слоев  $\Theta = 21.8^\circ$  и  $27.8^\circ$  (рис. 1а), соответственно. Поверхности таких биграфенов покрывались атомами водорода или фтора. Также были рассмотрены Янус-структуры, в которых одна поверхность покрыта водородом, а вторая – фтором. Адсорбция атомов приводит к изменению гибридизации атомов углерода биграфенов с  $sp^2$  на  $sp^3$  и, следовательно, открытию запрещенной зоны  $E_g$ . Наибольшее значение  $E_g = 4.50$  eV получено для фторированного диамана с  $\Theta = 27.8^\circ$  (рис. 2b). Расчеты показали энергетическую стабильность всех рассмотренных структур.

Изменение угла скрутки исходного бислоя, а также типа адсорбированных атомов позволит точную настройку свойств диамана, что может быть использовано при создании устройств нового поколения.

Расчеты выполнены с использованием ресурсов МСЦ РАН.

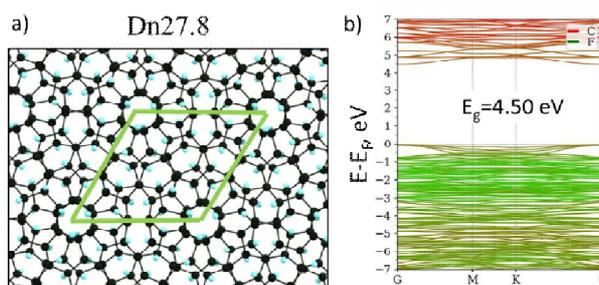


Рис. 1. Модель фторированного диамана с  $\Theta = 27.8^\circ$  (а) и его зонная структура (b)

**Финансирование:** проект РНФ № 24-22-00444.

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Chernozatonskii L.A., Sorokin P.B., Kvashnin A.G., Kvashnin D.G. Diamond-like C2H nanolayer, diamane: Simulation of the structure and properties. *JETP Letters*, 2009, vol. 90, pp. 134-138.
2. Chernozatonskii L.A. Demin V.A., Kvashnin D.G. *Fully Hydrogenated and Fluorinated Bigraphenes–Diamanes: Theoretical and Experimental Studies*. С, 2021. vol. 7, pp. 17.

## Спиновая селективность проводимости хиральных нанотрубок

Дьячков П.Н.<sup>1</sup>

e-mail: p\_dyachkov@rambler.ru

<sup>1</sup>Институт общей и неорганической химии им. Н.С. Курнакова РАН, Москва, Россия

Хиральные нанотрубки (НТ) обладают рядом интересных свойств, которые отсутствуют в нехиральных соединениях. В частности, благодаря винтовой геометрии хиральной НТ прохождение в ней постоянного электрического тока в направлении оси НТ сопровождается циклическим вращением электронов вокруг этой оси и, как следствие, образованием сильного постоянного магнитного поля в ее внутренней области. Прохождение переменного электрического тока приводит к образованию переменного электромагнитного поля, а сама НТ становится соленоидной наноантенной, излучающей в рентгеновском диапазоне. Под действием внешнего переменного магнитного поля возникает отклик электронов хиральных НТ в виде индуцированной ЭДС, при этом они ведут себя как рамочные наноантенны, принимающие в рентгеновской области.

В однопериодических спиральных объектах возможно образование спиновых токов, которые также становятся хиральными из-за зеркальной асимметрии и взаимной ориентации спинов и одномерного импульса  $k$ . Электроны со спинами определенной направленности перемещаются сквозь хиральный материал той же направленности на большие расстояния и, наоборот, различие между спиральностью соединения и спина электронов уменьшает подвижность электрона, что приводит к формированию спин-зависимых токов. В данной работе на примере кремниевых (Si) и золотых (Au) НТ с помощью релятивистского метода линеаризованных присоединенных цилиндрических волн [1] изучено влияние хиральности НТ на их спиновые свойства.

Рисунок 1 иллюстрирует влияние хиральности на электронные свойства Si НТ (7,7). Это трубка с центром инверсии, но при ее скручивании вокруг оси на угол  $\Delta\omega$  симметрия понижается и возникает хиральность, причем противоположные направления скручивания приводят к противоположным ориентациям винтовых осей. В нехиральной Si НТ электронные состояния на уровне Ферми соответствуют вращению электронов вокруг оси  $z$  по часовой стрелке и в противоположном направлении. Орбитальные магнитные моменты вращений ориентированы вдоль оси системы в противоположных направлениях, а по абсолютной величине не зависят от направления вращения электронов, что приводит к двукратному орбитальному вырождению. В нерелятивистском приближении ( $H_{S-O} = 0$ ) вместе с двойным спиновым вырождением это приводит к четырехкратно вырожденному уровню Ферми с нулевой запрещенной зоной.

Спин-орбитальная (СО) связь меняет дисперсионные кривые на уровне Ферми. Две пересекающиеся линии превращаются в две параболы, обращенные вниз для валентной зоны и вверх для зоны проводимости. Орбитальное вырождение снимается в области Ферми в высокосимметричной нескрученной нанотрубке, но спиновое вырождение сохраняется. Соединение оказывается узкозонным полупроводником с  $E_g = 1.3$  мэВ и дважды вырожденными спин-независимыми дисперсионными кривыми, соответствующими состояниям с параллельными и антипараллельными орбитальными и спиновыми моментами.

В релятивистских расчетах (7,7) Si НТ, скрученной вокруг оси  $z$ , вырождение уровней снимается и формируются полосы типа  $\alpha$  и  $\beta$ , соответствующие преимущественно параллельной и антипараллельной ориентации спинового и волнового  $k$ -векторов. Например, при  $\Delta\omega = 0.1^\circ/\text{\AA}$  минимальная щель  $E_{g,\alpha\alpha} = 3.8$  мэВ между зоной проводимости и валентной зоной соответствует прямому переходу между двумя состояниями с  $\alpha$ -спинами, а бóльшая щель  $E_{g,\beta\beta} = 8.4$  мэВ – переходу между состояниями со спином  $\beta$ . Спиновые расщепления валентной зоны и зоны проводимости равны  $E_{v,\alpha\beta} = 2.4$  и  $E_{c,\alpha\beta} = 2.6$  мэВ. Если изменить направление, но не величину угла скручивания трубки ( $\Delta\omega = 0.1^\circ/\text{\AA}$  на  $\Delta\omega = -0.1^\circ/\text{\AA}$ ), то знаки расщепления изменятся на противоположные.

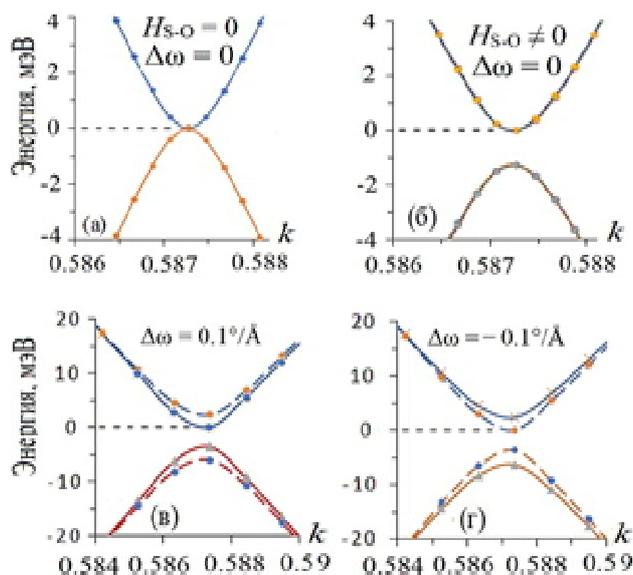


Рис. 1. Энергии электронов вблизи уровня Ферми (7,7) Si НТ, рассчитанные в различных условиях. Сплошные и штриховые линии соответствуют спинам  $\alpha$  и  $\beta$

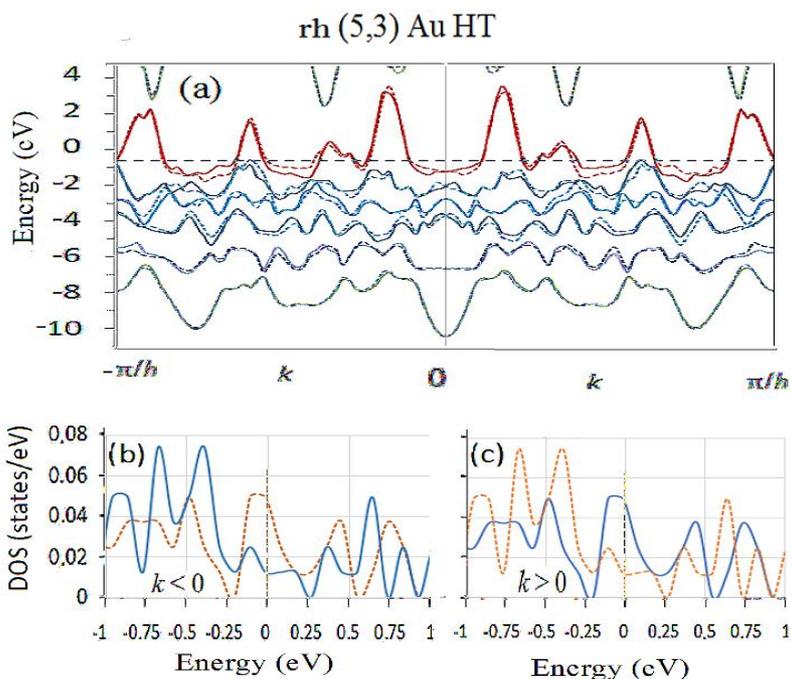


Рис. 2. Электронная структура правовинтовой хиральной Au НТ (5,3)

На рис. 2 приведены зонные структуры и плотности спиновых состояний для правовинтовой Au НТ (5,3). На уровне Ферми плотность состояний  $N_F(\alpha)|_{k>0} = 0.050$  1/эВ больше, чем  $N_F(\beta)|_{k>0} = 0.012$  1/эВ, т.е. концентрация подвижных электронов со спином  $\alpha$  в четыре раза больше, чем со спином  $\beta$  для направления  $z > 0$ . Кроме того, при  $z > 0$  вероятность прохождения электронов сквозь хиральный барьер больше для  $\alpha$ -спинов ( $\tau_{\uparrow\uparrow}$ ), чем для  $\beta$ -спинов ( $\tau_{\uparrow\downarrow}$ ). Поэтому в правовинтовой Au НТ (5,3) для положительного направления  $z > 0$  плотность тока  $I(\alpha)|_{z>0}$  будет на порядок больше, чем  $I(\beta)|_{z>0}$ . Для обратного направления  $z < 0$  плотность тока  $I(\beta)|_{z<0}$  будет превышать  $I(\alpha)|_{z<0}$ , и будет доминировать транспорт  $\beta$  электронов. При переходе к левовинтовой Au НТ (5,3) порядок спиновых состояний на рис. 2 обращается, и в направлении  $z > 0$  будет доминировать ток  $\beta$  электронов по сравнению с  $\alpha$ , а в противоположном направлении  $z < 0$  ток  $\alpha$  электронов.

**Финансирование:** Работа выполнена при поддержке Российского научного Фонда, грант № 24-23-00037, <https://rscf.ru/project/24-23-00037/>.

### **СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ**

1. D'yachkov P.N. *Quantum chemistry of nanotubes: electronic cylindrical waves*. 2019, CRC Press. London: Taylor and Francis, 212 p.

# Исследование взаимодействия углеродных наноструктур с атомом серебра

Ерофеев Д.Р.<sup>1</sup>, Борознина Н.П.<sup>1</sup>, Запороцкова И.В.<sup>1</sup>, Запороцков П.А.<sup>1</sup>

*e-mail: boroznina.natalya@volsu.ru*

<sup>1</sup>ФГАОУ ВО Волгоградский государственный университет, Волгоград, Россия

С момента своего первого открытия после массового производства фуллеренов углеродные нанотрубки (УНТ) стали предметом интенсивных исследований в химии, физике и материаловедении. Как одностенные нанотрубки, так и многостенные нанотрубки бывают разных размеров и киральности, тем самым демонстрируя удивительно разнообразные физические свойства. Ожидается, что УНТ будут потенциально полезны в электронных устройствах в качестве квантовой проволоки, газовой сенсорной промышленности, технологии нанопинцетов, микроскопии, атомно-силовой микроскопии высокого разрешения (АСМ) и автоэмиссионных дисплеев [1].

Нанотрубки подразделяются на одностенные нанотрубки (ОУНТ) и многостенные нанотрубки (МУНТ), и обе категории могут быть функционализированы и нефункционализированы, чтобы обеспечить возможность использования в различных областях науки и техники.

Что касается наночастиц серебра, то наночастицы серебра демонстрируют превосходную активность поверхностно-усиленного комбинационного рассеяния света, что вызвало большой интерес в приложениях биосенсорства. Наночастицы серебра также хорошо известны своими антибактериальными свойствами. Кроме того, во многих работах сообщалось, что НЧ Ag обладают каталитической активностью в отношении малых молекул [3].

Многие характерные свойства наноматериалов зависят от их размера, морфологии и покрытия поверхности. Разработка методов получения, позволяющих эффективно контролировать размер, морфологию и плотность наночастиц, имеет решающее значение для их применения.

В данной работе был смоделирован процесс добавления атома серебра к углеродной нанотрубке типа (6,0). Ее модель представлена на рисунке 1. Моделирование выполнено с использованием расчетного метода DFT, функционала B3LYP и базисного набора 6-31G.

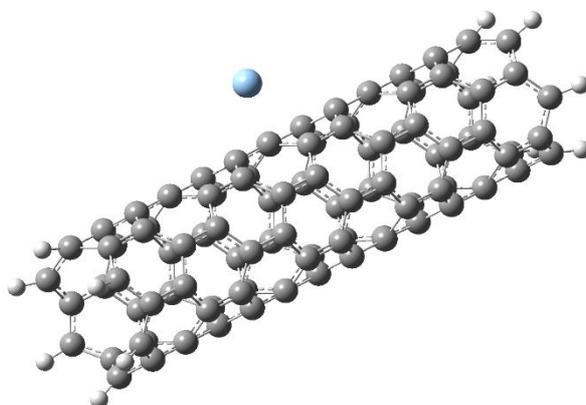


Рис. 1. Модель УНТ типа 6.0 с присоединенным атомом серебра, находящимся над центром атома углерода

Приближение атома серебра к выбранному центру на поверхности УНТ моделировалось пошаговым приближением перпендикулярно оси нанотрубки с шагом 0,1 Å. По результатам расчетов были построены энергетические кривые взаимодействия атома серебра с поверхностью нанотрубки.

Наличие характерного минимума на кривых позволяют утверждать, что атом серебра будет успешно адсорбироваться на поверхности углеродной нанотрубки. Наиболее энергетически выгодным является положение атома серебра над атомом углерода. Расстояние взаимодействия и соответствующая ему энергия характерны для физической адсорбции. На рисунке 2 представлено сводное изображение кривых зависимости энергии адсорбции от положения атома серебра.

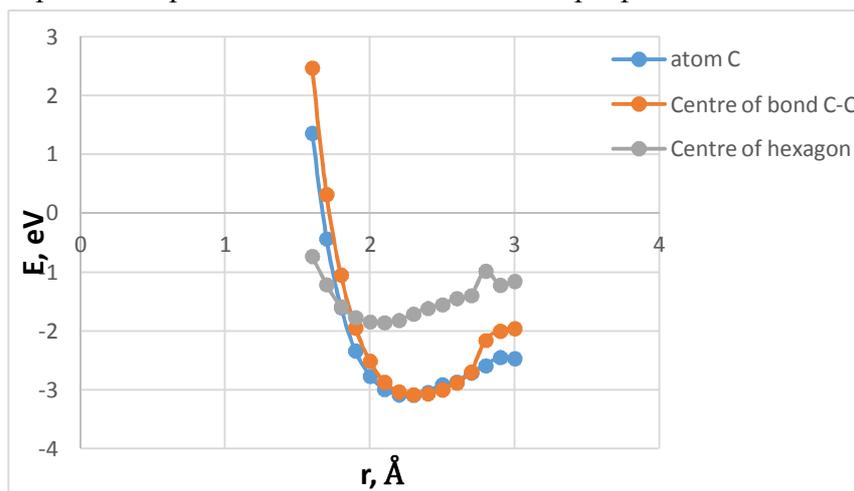


Рис. 2. Энергетические кривые взаимодействия атома серебра с поверхностью УНТ для трех вариантов расположения атома относительно поверхности

Таким образом, было установлено, что модифицирование углеродных нанотрубок путем присоединения к их поверхности атомов серебра возможно управление их электронными свойствами, в частности, шириной запрещенной зоны. Учитывая наличие зависимости между шириной запрещенной зоны и показателем преломления, становится возможным применение рассмотренных комплексов для оптических приложений. Подобные комплексы также перспективны для использования в качестве биосенсоров, позволяющих детектировать присутствие в среде микроколичеств различных веществ на основании указанных закономерностей, что в конечном счете делает их чрезвычайно полезными для экологических и медицинских исследований.

**Финансирование:** Работа выполнена в рамках государственного задания Министерства науки и высшего образования РФ (тема "FZUU-2023-0001").

### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Mahajan S.V., Hasan S.A., Cho J., Shaffer M.S.P., Boccaccini A.R., Dickerson J. H. Carbon nanotube–nanocrystal heterostructures fabricated by electrophoretic deposition. *Nanotechnology*, 2008, V. 19, pp. 195301.
2. Mîndroiu M., Pirvu C., Ion R., Demetrescu I. Comparing performances of nanoarchitectures fabricated Ti6Al7Nb anodizing in two kinds of electrolytes. *Electrochim. Acta*, 2010, V. 56(10), pp. 193.

## **Применение углеродных нанотрубок в качестве компонента ультратонкого лекарственного покрытия для медицинских стентов**

*Запороцкова И.В.<sup>1</sup>, Чешева М.Ф.<sup>1</sup>, Звонарева Д.А.<sup>1</sup>*

*e-mail: zvonareva@volsu.ru*

*<sup>1</sup>ФГАОУ ВО Волгоградский государственный университет, Волгоград, Россия*

Сегодня развитие медицины связано с использованием высокотехнологичных методов лечения, однако их распространение ограничено высокой стоимостью расходных материалов, включая стенты. К сожалению, большинство используемых в России стентов импортируются, что не только создает зависимость от иностранных поставщиков, но и значительно повышает стоимость лечения для пациентов.

Поэтому актуален поиск и исследование новых композитных покрытий для медицинских стентов, используемых в кардиохирургии для стентирования кровеносных сосудов и в гастроэнтерологии для эндобилиарного протезирования. Этот процесс включает подбор полимеров-носителей и компонентов лекарственных покрытий, которые позволят создать качественное тонкослойное покрытие с увеличенным временем десорбции лекарственного препарата.

В качестве матрицы полимера такого покрытия можно использовать известные биоразлагаемые полимеры, такие как поливинилпирролидон, полимолочная кислота и поликапролактон, в которые вводится лекарственное средство. Для обеспечения пролонгированного высвобождения препарата предлагается использовать уникальный современный наноматериал – углеродные нанотрубки. Они, благодаря своим превосходным сорбционным, механическим и адгезионным свойствам, могут применяться для улучшения сцепления нового покрытия, которое создается путем насыщения биополимера лекарственными препаратами и углеродными нанотрубками.

Чтобы доказать возможность создания такого покрытия, мы создали модели на основе выбранных полимерных матриц с добавкой углеродных нанотрубок и провели теоретическое исследование взаимодействия ключевых компонентов сверхтонкого лекарственного покрытия, состоящего из полимера-носителя с внедренными углеродными нанотрубками, и некоторых лекарственных препаратов с использованием теории функционала плотности.

Поливинилпирролидон (ПВП) – это полимер, получаемый из мономера п-винилпирролидона методом радикальной виниловой полимеризации [1-2]. Это вещество широко используется в качестве полимера-носителя, поскольку оно оказывается биологически инертным, не подвергается ферментативному расщеплению и выводится из организма через почки в неизменной форме [3].

Полимолочная кислота (ПМК) – это термопластичный сложный полиэфир, обладающий биологической совместимостью, биоразложением, низкой токсичностью и хорошими механическими свойствами [4]. Благодаря этим характеристикам, полимер нашёл применение в медицине для создания имплантируемых медицинских изделий.

Поликапролактон (ПКЛ) – это алифатический сложный полиэфир, способный разлагаться в организме человека на безопасные компоненты в течение определённого

времени [4]. Тканеинженерные конструкции из ПКЛ обладают хорошими адгезионными свойствами.

Углеродные нанотрубки можно использовать для улучшения прочности и связывающей способности тонкоплёночного покрытия медицинских стентов, а также для продления выхода лекарственного препарата из покрытия [5].

Чтобы доказать эффективность покрытия и предсказать физико-химические свойства материалов, мы провели квантово-химические расчёты с использованием теории функционала плотности (DFT) [6].

#### **Механизм создания трехкомпонентного комплекса, включающего полимер-носитель поливинилпирролидон, углеродную нанотрубку и лекарственный препарат дексаметазон**

Для исследования взаимодействия компонентов лекарственного покрытия была использована однослойная углеродная нанотрубка типа (6,6). Процесс взаимодействия моделировался пошаговым приближением фрагмента ПВП к атому углерода поверхности нанотрубки. Также было смоделировано присоединение молекулы дексаметазона к комплексу «ПВП + УНТ» (рис.1). Полученная энергетическая кривая показала минимум потенциальной энергии  $-0,04$  eV на расстоянии  $3,6$  Å, что указывает на образование стабильного комплекса при физическом взаимодействии.

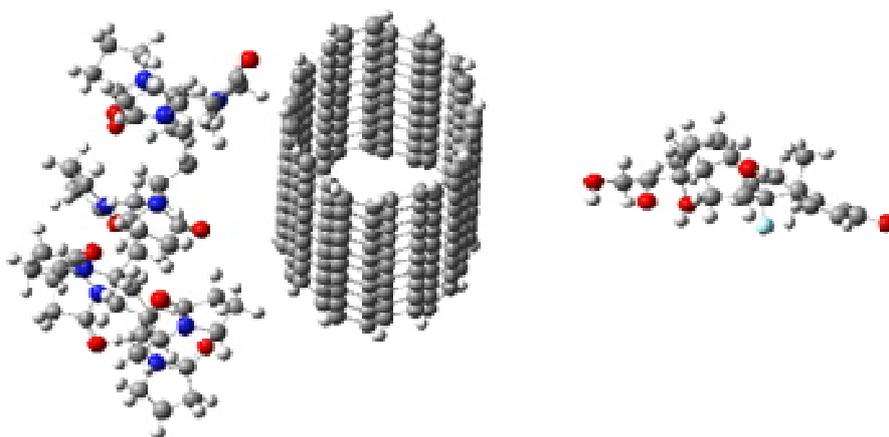


Рис. 1. Модель взаимодействия дексаметазона с комплексом «ПВП+УНТ»

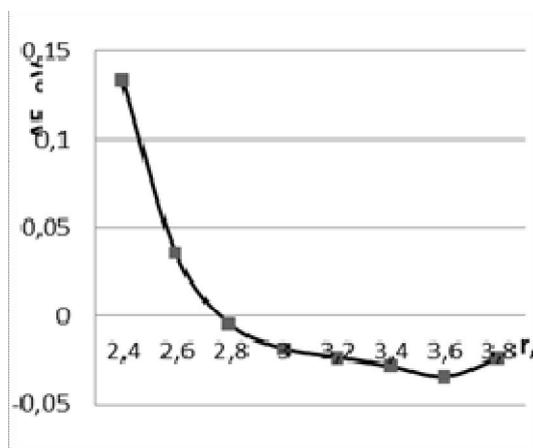


Рис. 2. Энергетическая кривая взаимодействия дексаметазона с комплексом поливинилпирролидона и УНТ

### Механизм взаимодействия в комплексе "ПВП+УНТ+доксорубин"

Процесс взаимодействия между фрагментом ПВП и комплексом «углеродная нанотрубка (УНТ) + доксорубин» был смоделирован пошагово с изменением расстояния между ними от 4,5 до 1 Å (рис. 3). В результате расчётов была получена энергетическая кривая, показывающая минимум на расстоянии 2,4 Å с энергией адсорбции -0,48 эВ. Это указывает на образование устойчивого комплекса «ПВП + УНТ + доксорубин».

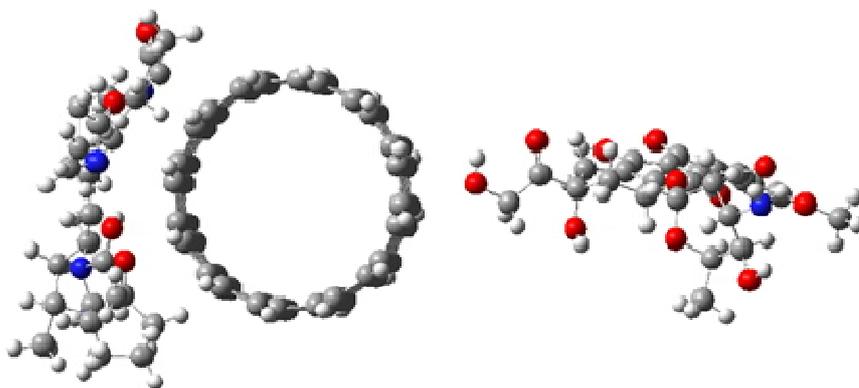


Рис. 3. Модель оптимизированного комплекса "доксорубин + УНТ + ПВП"

### Механизм взаимодействия в комплексе "ПКЛ+ПМК+УНТ+доксорубин"

Процесс приближения доксорубина к оптимизированному комплексу осуществлялся с интервалом в 0,2 Å. Структурная модель комплекса показана на рисунке 4. Наблюдение минимума на расстоянии 2,4 Å, что соответствует энергии адсорбции в -5,17 эВ, означает успешное взаимодействие сополимера полимолочной кислоты, поликапролактона, доксорубина и углеродной нанотрубки.

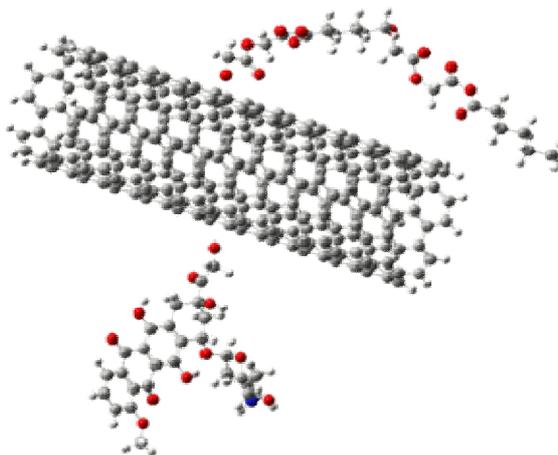


Рис. 4. Модель комплекса "ПКЛ+ПМК+УНТ+доксорубин"

Медицинское стентирование является одним из способов лечения в современной практике. Исследование механизмов взаимодействия полимерных матриц с углеродными нанотрубками и лекарственными препаратами показало, что добавление нанотрубок увеличивает стойкость покрытия, механическую прочность стента и обеспечивает пролонгированное действие лекарства.

Лучшая полимерная матрица для таких стентов – сополимер поликапролактона и полимолочной кислоты.

**Финансирование:** Работа выполнена в рамках государственного задания Министерства науки и высшего образования РФ (тема "FZUU-2023-0001").

### **СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ**

1. Gunatillake P.A., Adhikari R. Biodegradable synthetic polymers for tissue engineering. *European Cells and Materials*. 2003. V. 5. P. 1-16.
2. Кедик С.А. Полимеры для систем замедленной доставки лекарственных веществ (обзор). *Разработка и регистрация лекарственных средств*. 2013. № 3. С.18–35.
3. Алексеев К.В., Грицкова И.А., Кедик С.А. *Полимеры для фармацевтической технологии*. М.: Изд-во ЗАО ИФТ. 2011. 511 с.
4. Борисов Е. В центре внимания – биоразлагаемые полимеры. *The Chemical Journal*. 2005. №. 5. С. 68
5. О влиянии углеродных нанотрубок на физико-механические свойства полипропилена / И. В. Запороцкова, В. Л. Калиниченко, Л. В. Кожитов [и др.]. *НБИ технологии*. 2021. Т. 15, № 2. С. 27-36.
6. Koch W. A Chemist's Guide to Density Functional Theory. *Weinheim: Wiley-VCH*. 2002. P. 19-28.

# Особенности отражения СВЧ-излучения от композита «эпоксидная смола – магнитная жидкость – углеродные нанотрубки»

Постельга А.Э.<sup>1</sup>, Игонин С.В.<sup>1</sup>

*e-mail: igoninsemen@ya.ru*

<sup>1</sup>*Саратовский национальный исследовательский государственный университет им. Н.Г. Чернышевского, Саратов, Россия*

Композиты на основе магнитной жидкости с многостенными углеродными нанотрубками (УНТ) могут найти широкое применение в различных областях, например, в качестве поглощающих и отражающих электромагнитное излучение материалов [1, 2]. В работе [3] показана возможность выстраивания углеродных нанотрубок в магнитной жидкости вдоль линий индукции магнитного поля. Более того, существуют способы [4] диспергирования УНТ в магнитной жидкости, при которых наночастицы магнетика проникают внутрь УНТ.

В настоящей работе исследовались образцы, представляющие собой композит эпоксидная смола – магнитная жидкость – многостенные углеродные нанотрубки с различной концентрацией. Магнитная жидкость представляла собой однородную взвесь однодоменных частиц магнетита в керосине, стабилизированных олеиновой кислотой с параметрами: диаметры ферромагнитных частиц 10 nm, объемная доля твердой фазы 0.14. Образцы изготавливались парами. Высушивание первого образца производилось в отсутствии магнитного поля, при этом образовывался композит эпоксидной смолы с каплями микронных размеров, состоящими из магнитной жидкости с УНТ. Второй образец высушивался в присутствии магнитного поля с индукцией 130 mT, при этом в эпоксидной смоле образовывались вытянутые структуры, в виде длинных “проволок” из магнитной жидкости и УНТ.

Проводилось экспериментальное исследование амплитудно-частотных характеристик коэффициента отражения электромагнитного излучения СВЧ-диапазона, взаимодействующего с фотонным кристаллом, состоящим из периодически чередующихся слоев. Нечетные слои представляли собой пластины из керамики ( $\text{Al}_2\text{O}_3$ ,  $\epsilon_{\text{Al}_2\text{O}_3} = 9.6$ ), четные – из фторопласта ( $\epsilon_{\text{fp}} = 2$ ). Толщина нечетных отрезков  $d_{\text{Al}_2\text{O}_3} = 1.0$  мм, четных  $d_{\text{fp}} = 10$  мм. Слои полностью заполняли поперечное сечение прямоугольного волновода размером 23x10 mm. Измеряемые образцы располагались в центральном слое и представляли собой нарушение периодичности фотонной структуры. Исследовался фотонный кристалл, состоящий из одиннадцати слоев, аналогичный [5]. Измерение АЧХ коэффициента пропускания исследуемого фотонного кристалла в трехсантиметровом диапазоне длин волн проводились с использованием СВЧ-анализатора цепей Agilent Tech. 5242A PNA-X Network Analyzer. На спектре наблюдается пик отражения  $R_p$  в виде резкого минимума. Смещение  $R_p$  по частоте и значению зависит от свойств нарушенного слоя (рис. 1).

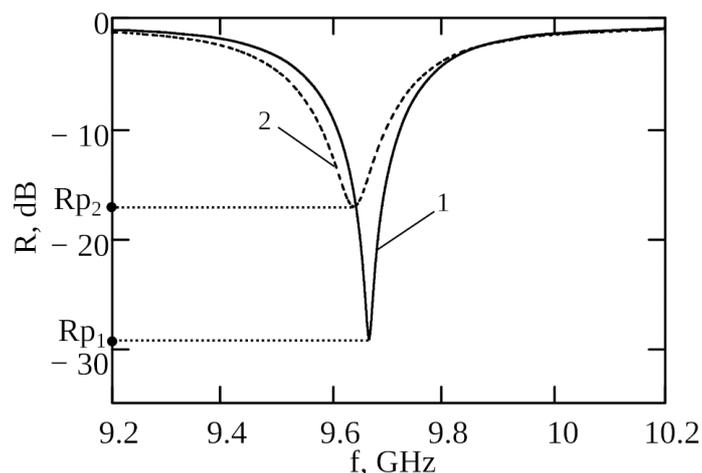


Рис. 1. Частотные зависимости коэффициента отражения электромагнитной волны СВЧ-диапазона от фотонной структуры, в качестве нарушения выступает композит с массовой долей УНТ 0.1%: кривая 1 – высушенный без магнитного поля, кривая 2 – в присутствии магнитного поля с индукцией 130 мТ

Добавление УНТ в композит приводит к увеличению его проводимости, как следствие, наблюдается возрастание коэффициента отражения от образцов с увеличением массовой доли УНТ (рис. 2, кривая  $R_{p1}$ ). Коэффициент отражения возрастает сильнее для образцов, высушенных в присутствии магнитного поля (рис. 2, кривая  $R_{p2}$ ). Образующиеся нитевидные структуры ориентированы параллельно электрической составляющей СВЧ волны в волноводе, что приводит к более эффективному взаимодействию электромагнитного излучения с композитом.

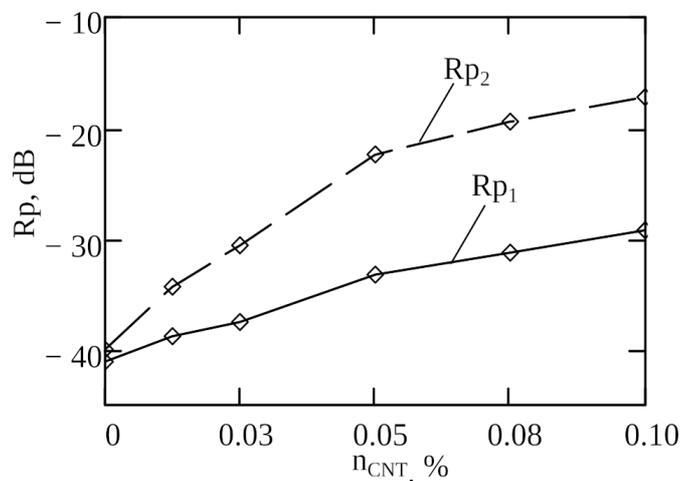


Рис. 2. Зависимость величины пика коэффициента отражения от массовой доли УНТ в композите:  $R_{p1}$  – в качестве нарушения используется образец, высушенный без магнитного поля,  $R_{p2}$  – в присутствии магнитного поля с индукцией 130 мТ

При увеличении концентрации УНТ в композите увеличивается проводимость образцов, высушенных без магнитного поля, а количество агломератов не изменяется, поэтому зависимость разности пиков коэффициентов отражения  $\Delta R = R_{p2} - R_{p1}$  (рис. 3) выходит на насыщение.

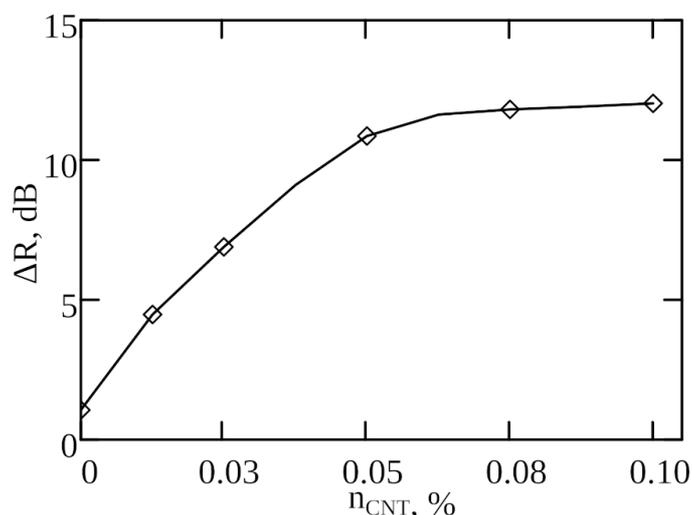


Рис. 3. Разность пиков коэффициентов отражения  $\Delta R$  для образцов, высушенных без и в присутствии магнитного поля

Таким образом, была показана возможность изготовления композитов в твердой матрице из эпоксидной смолы с магнитной жидкостью и УНТ, которые обладают анизотропией электрических свойств в сантиметровом диапазоне длин волн.

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Singh A., Mishra M., Amita Chandra and S K Dhawan. Graphene oxide/ferrofluid/cement composites for electromagnetic interference shielding application. *Nanotechnology*, 2011, vol. 22, pp. 465701.
2. Sambyal P., Singh A., Verma M., Gupta A., Singh B., Dhawan S. Designing of MWCNT/ ferrofluid/flyash multiphase composite as safeguard for electromagnetic radiation. *Adv. Mater. Lett.*, 2015, vol. 6(7), pp. 585-591.
3. Correa-Duarte M.A., Grzelczak M., Salgueirino-Maceira V., Giersig M., Liz-Marzan L.M., Farle M., Sieradzki K., Diaz R. Alignment of Carbon Nanotubes under Low Magnetic Fields through Attachment of Magnetic Nanoparticle. *J. Phys. Chem. B*, 2005, vol. 109, no. 41, pp. 19060-19063.
4. Korneva G., Ye H., Gogotsi Y., Halverson D., Friedman G., Bradley J., Kornev K.G. Carbon Nanotubes Loaded with Magnetic Particles. *Nano Lett.*, 2005, vol. 5, no. 5, pp. 879-884
5. Postelga A., Igonin S., Agapova J. *O vozmozhnosti upravleniya elektrofizicheskimi kharakteristikami fotonnogo kristalla pri ispol'zovanii v kachestve narushennogo sloya magnitnogo kompozita* [On the possibility of controlling the electrophysical characteristics of a photonic crystal when using a magnetic composite as a damaged layer]. *Sbornik nauchny`x trudov VIII Mezhdunarodnoj Stavropol`skoj konferencii po magnitny`m kolloidam* [Collection of scientific papers of the VIII International Stavropol Conference on Magnetic Colloids], 2023, pp. 91-98.

# Особенности взаимодействия электромагнитных импульсов с тонкой пленкой полимерного композита

Конобеева Н.Н.<sup>1</sup>

e-mail: yana\_nn@volsu.ru

<sup>1</sup>ФГАОУ ВО «Волгоградский государственный университет», Волгоград, Россия

Как известно, в области микро и нанoeлектроники широко используются тонкие пленки различных материалов (металл, диэлектрик, полупроводник, топологический изолятор) [1]. Они обладают свойствами, которые существенно отличаются по сравнению с массивными структурами. Это обусловлено изменением физических процессов, протекающих в разных по толщине образцах.

В данной работе тонкая пленка представляет собой композитный материал из полимера и углеродных нанотрубок [2]. Такой выбор объясняется положительным влиянием обоих материалов друг на друга. Здесь наибольшее значение имеет возможность с помощью полимера создать упорядоченную структуру из нанотрубок.

Исследование взаимодействия электромагнитного излучения с различными веществами является одной из приоритетных задач современной фотоники. В частности, большой интерес представляет задача о распространении предельно коротких оптических импульсов [3] с различным профилем в нелинейных средах [4], в том числе содержащих углеродные нанотрубки [5]. Выявлены параметры среды, которые позволяют контролировать характеристики импульса и обеспечивают его локализованное распространение.

В настоящей работе будет проанализировано влияние параметров тонкой пленки на форму и энергию предельно короткого оптического импульса. В частности, состава пленки (наличие/отсутствие нанотрубок), ее толщины, а также доли полимера в композитном материале.

Динамика импульса для разных типов пленок представлена на рисунке 1.

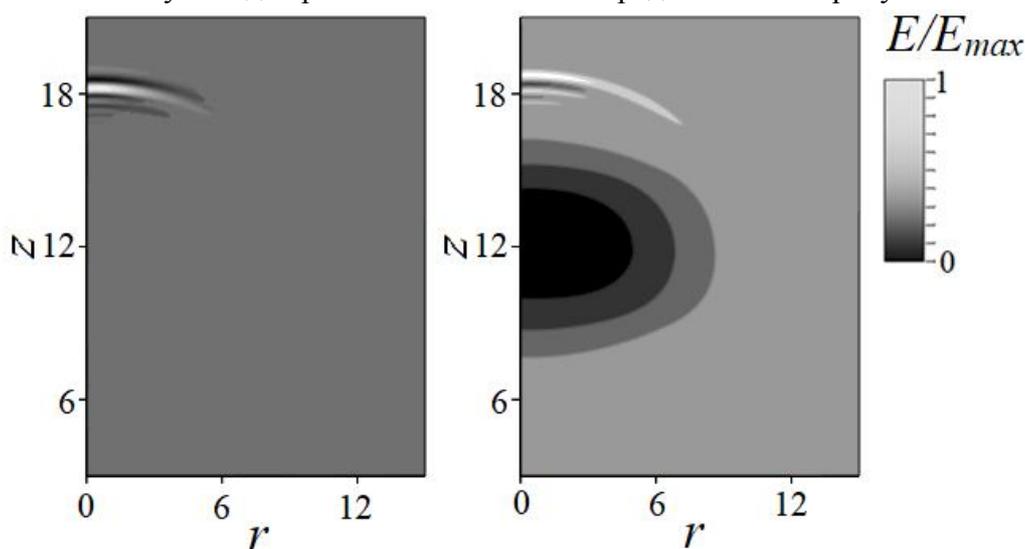


Рис. 1. Зависимость напряженности электрического поля импульса, отнесенная к максимальному значению  $E_{max}$  от продольной координаты: сплошная кривая – тонкая полимерная пленка с УНТ; точечная кривая – тонкая пленка полимера без УНТ

**Финансирование:** Работа выполнена в рамках государственного задания Министерства науки и высшего образования РФ (тема "FZUU-2023-0001").

### **СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ**

1. Pandey A., Yadav R., Kaur M., Singh P., Gupta A., Husale S. High performing flexible optoelectronic devices using thin films of topological insulator. *Scientific Reports*, 2021, vol. 11, art. no. 832.
2. Zaidi B., Smida N., Althobaiti M.G. Polymer/Carbon nanotube based nanocomposites for photovoltaic application: functionalization, structural and optical properties. *Polymers*, 2022, vol. 14, Issue 6, Art. no. 1093.
3. Kartner F.X. *Few-Cycle Laser Pulse Generation and Its Applications*. Heidelberg, Springer Berlin, 2004, 448 p.
4. Sazonov S.V. Few-cycle optical pulses in the gain media. *J. Phys.: Conf. Ser.*, 2019, vol. 1283. art. no. 012013.
5. Belonenko M.B., Konobeeva N.N. Two-dimensional non-topological solutions of Maxwell's equations in a medium of strained carbon nanotubes with impurities. *Nanosystems: Physics, Chemistry, Mathematics*, 2022, V. 13, Is. 1, pp. 45–49.

## Углеродные нанотрубки и терморасширенный графит в составе эпоксидно-аминных композитных покрытий

Мальцева Н.А.<sup>1</sup>, Лыга Р.И.<sup>1</sup>, Михальчук В.М.<sup>1</sup>

*e-mail: maltsevanatalia.chem@gmail.com*

<sup>1</sup>ФГБОУ ВО «Донецкий государственный университет», Донецк, Россия

Углеродные нанотрубки (УНТ) характеризуются чрезвычайно высокой прочностью  $sp^2$ -связей С–С, большой плотностью упаковки атомов в графеновых плоскостях и малой плотностью дефектов структуры. Отсюда следуют высокие механические и физические параметры (модуль Юнга, твердость на сжатие). В силу особенностей своих свойств углеродные нанотрубки применяются в составе матрицы, которая может иметь полимерную природу, например, эпоксидную.

Другим углеродсодержащим наполнителем полимерных композитов, вызывающим интерес, является терморасширенный графит (ТРГ). Для ТРГ характерен не только весь спектр характеристик, присущих обычному графиту (термическая и химическая стойкость, низкий коэффициент трения, высокая сорбционная емкость по отношению к органическим веществам, низкая насыпная плотность и др.), но также возможно модифицирование его свойств с целью создания функциональных материалов и нанокompозитов.

Авторы исследования получили эпоксидные композиты аминного отверждения, наполненные углеродными нанотрубками или терморасширенным графитом. Для обеспечения равномерного распределения частиц наполнителя по всему объему композита при смешении компонентов применяли ультразвуковое диспергирование, а в случае терморасширенного графита – еще и органический растворитель. Изучали морфологию полученных композитов с помощью растровой электронной микроскопии, а также влияние указанных наполнителей на защитные свойства покрытий на их основе.

Более высокую устойчивость к высокотемпературному окислению кислородом проявили композиты, содержащие небольшое количество ТРГ и дополнительно 5 масс.% кремнеземного наполнителя, синтезированного голь-гель методом. Введение углеродных нанотрубок в состав эпоксидной полимерной матрицы, даже при небольших концентрациях (до 2 масс.%), оказалось более эффективным с этой точки зрения.

Углеродные нанотрубки в составе полимерных композитных покрытий также проявляют ингибирующее влияние на процесс электрохимической коррозии металлической поверхности. Эпоксидное покрытие, содержащее 1 масс.% УНТ, повысило антикоррозионное сопротивление алюминиевого сплава Д16 в 25 раз. Однако с увеличением степени наполнения композитов параметры, характеризующие защитные свойства покрытий, несколько снижаются.

Авторы исследования пытались повысить эффективность антикоррозионной защиты сплава Д16 разработанными композитными покрытиями, содержащими ТРГ, путем предварительной обработки наполнителя поверхностно-активным веществом. Однако должного эффекта это не оказало. Существенно повысить защитные параметры удалось путем дополнительного введения в состав покрытий ингибитора коррозии металлов – 1,2,3-бензотриазола. В этом случае антикоррозионное сопротивление подложки увеличилось в 140 раз по сравнению с непокрытым сплавом, что позволило говорить о

синергическом эффекте углеродсодержащего наполнителя и бензотриазола. И такие результаты достигнуты при концентрации ТРГ в эпоксидно-аминном покрытии 1,5 масс.%.

Проведенные исследования показали, что для повышения параметров термомеханических и защитных свойств эпоксидно-графитовых композитных материалов необходимо отказаться от использования органических растворителей при синтезе композитов и с особым вниманием подойти к вопросам смешения исходных компонентов реакционной смеси.

**Финансирование:** работа выполнена в рамках государственного задания (шифр научно-исследовательской работы FRRE-2023-0006, регистрационный номер 124012400357-1).

## **Многослойные наноструктуры на основе оксида гафния для создания стабильных мемристивных систем**

*Мартышов М.Н.<sup>1</sup>, Кучумов И.Д.<sup>1</sup>, Швецов Б.С.<sup>1,2</sup>, Форм П.А.<sup>1</sup>*

*e-mail: mmartyshov@mail.ru*

*<sup>1</sup>Физический факультет МГУ имени М.В.Ломоносова, Москва, Россия*

*<sup>2</sup>Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт», Москва, Россия*

В настоящее время считается, что такие элементы, как мемристоры, могут быть использованы для создания энергоэффективной и быстродействующей памяти, а также различных нейроморфных систем. Мемристор представляет собой конденсаторную структуру, в которой тонкий диэлектрический слой заключен между двумя металлическими электродами. Под действием напряжения в результате движения ионов металла или кислородных вакансий происходит рост проводящих нитей (филаментов), которые соединяют между собой электроды. При подаче напряжения противоположной полярности происходит разрушение данных филаментов. Таким образом, подавая на структуру напряжение определенной величины и полярности можно контролируемым образом переводить её из одного резистивного состояния в другое. Мемристивный эффект в настоящее время обнаружен во многих неорганических материалах, таких как оксиды металлов, халькогениды, нитриды и др. [1] Также активно изучаются мемристивные свойства структур на основе органических полимеров, например, парилена [2]. Оксид гафния ( $\text{HfO}_2$ ) благодаря своей стабильности, химической стойкости и совместимости с КМОП-технологией, рассматривается как один из наиболее перспективных материалов для создания мемристивных систем [3].

Для создания устройств памяти и вычислительных систем на основе мемристоров, необходимо решение проблем, связанных с нестабильностью параметров, характеризующих процесс резистивного переключения (напряжение переключения, отношение сопротивлений в непроводящем и проводящем состояниях и т.д.). Существует несколько подходов, направленных на улучшение характеристик мемристоров и повышение стабильности их работы. В частности, для этих целей может использоваться модификация диэлектрического слоя с помощью введения различных добавок, дополнительных слоев или термического отжига, а также создание на поверхности металлических контактов искусственных неоднородностей [4]. В данной работе изучены наноструктуры с тонким слоем оксида гафния в качестве диэлектрика. Исследован эффект резистивного переключения в таких структурах и изучена возможность улучшения характеристик мемристоров на основе оксида гафния за счет управления электрофизическими характеристиками диэлектрического слоя.

Многослойные наноструктуры  $\text{Me}/\text{HfO}_2/\text{Me}$  формировались методом электронно-лучевого напыления с использованием гранул  $\text{HfO}_2$ . На первом этапе на подложку монокристаллического кремния наносился слой золота, который являлся нижним электродом структуры. После этого наносился диэлектрический слой оксида гафния. Сверху на слой  $\text{HfO}_2$  наносились контакты размером  $0,2 \times 0,5 \text{ мм}^2$  из различных металлов.

Были изучены мемристивные свойства наноструктур с толщиной слоя оксида гафния в диапазоне от 20 до 60 нм и различными материалами верхнего контакта, такими как  $\text{Cu}$ ,

Au, Ti. Обнаружено, что толщина слоя оксида гафния существенно влияет на все параметры, характеризующие процесс резистивного переключения. Наилучшие характеристики были получены на структурах с толщиной слоя  $\text{HfO}_2$  30-40 нм, в которых верхний контакт был выполнен из титана. Показано, что в подобных структурах помимо двух состояний с минимальным ( $R_{\text{on}}$ ) и максимальным ( $R_{\text{off}}$ ) сопротивлениями, может быть получено более 10 промежуточных состояний. Эти состояния имеют сопротивления от 1 до 100 кОм и остаются стабильными во времени, что очень важно для практических применений. Было обнаружено, что изменение давления кислорода в камере в процессе нанесения диэлектрической пленки влияет прежде всего на её поверхностные свойства. Это проявляется в существенных различиях в электрофизических свойствах пленок при их измерении на воздухе и в вакууме. Показано, что с помощью термического отжига в атмосфере воздуха можно проводить кристаллизацию пленки оксида гафния, которая изначально имеет аморфную структуру. Образование нанокристаллов моноклинной структуры в пленке происходит при температурах 500 °С и выше. Это подтверждается как методом рентгеновской дифракции, так и данными, полученными методами инфракрасной спектроскопии и спектроскопии комбинационного рассеяния света. Показано, что в результате термического отжига проводимость пленок  $\text{HfO}_2$  уменьшается примерно в 2 раза, что может быть связано с уменьшением числа кислородных вакансий в результате упорядочивания структуры. Полученные данные открывают возможности создания стабильных мемристивных систем на основе оксида гафния.

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

### **СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ**

1. Shvetsov B.S., Matsukatova A.N., Martyshov M.N., Zhigunov D.M., Ilyin A.S., Savchuk T.P., Forsh P.A., Kashkarov P.K. Electron-beam deposition for the synthesis of memristive structures based on hafnium oxide. *Nanobiotechnology Reports*, 2023, vol. 18, pp. 416-420.
2. Minnekhanov A.A., Shvetsov B.S., Martyshov M.N., Nikiruy K.E., Kukueva E.V., Presnyakov M.Yu., Forsh P.A., Rylkov V.V., Erokhin V.V., Demin V.A., Emelyanov A.V. On the resistive switching mechanism of parylene-based memristive devices, *Organic Electronics*, 2019, vol. 74, pp. 89-95.
3. Hah J., West M.P., Athena F.F., Hanus R., Vogel E.M., Graham S. Impact of oxygen concentration at the  $\text{HfO}_x/\text{Ti}$  interface on the behavior of  $\text{HfO}_x$  filamentary memristors. *Electronic materials*, 2022, vol. 57, pp. 9299-9311.
4. Banerjee W., Liu Q., Hwang H. Engineering of defects in resistive random access memory devices. *Journal of Applied Physics*, 2020, vol. 127, pp. 051101-1-051101-16.

## **Разработка ориентированных углеродных наноструктур для электродных материалов и электрохимических систем накопления энергии**

*Петрунин А.С.<sup>1</sup>*

*e-mail: alexspetrinin@yandex.ru*

*<sup>1</sup>ФГБОУ ВО «Национальный исследовательский технологический университет «МИСиС», Москва, Россия*

Развитие технологий в сфере накопления энергии в значительной степени зависит от качества доступных электродных материалов. Углеродные наноструктуры могут пополнить данный список благодаря их высокой электропроводности, большой удельной площади поверхности и хорошей электрохимической стабильности, что является важными критериями для повышения производительности и устойчивости аккумуляторов и энергетических устройств.

Целью работы является исследование влияния углеродных наноструктур на характеристики электрохимических систем накопления энергии. Основной задачей стало получение массивов многостенных углеродных нанотрубок (МУНТ) и их использование в качестве электродного материала.

В работе представлена методика синтеза вертикально ориентированных массивов МУНТ на кремниевых подложках с помощью химического осаждения из газовой фазы. Показана практическая применимость МУНТ при работе термоэлектрохимической ячейки, демонстрирующей увеличение мощности на 50 % по сравнению с референсными никелевыми электродами.

Разработанный метод синтеза позволяет получить высококачественные МУНТ с низким уровнем дефектов и хорошей устойчивостью к температурному воздействию до 600 °С. Использование МУНТ как электродного материала в электрохимических системах позволило увеличить их эффективность. Полученные результаты подтверждают перспективы использования ориентированных углеродных наноструктур для создания эффективных электродных материалов, что может стать основой для развития нового поколения электрохимических аккумуляторов с улучшенными характеристиками.

## **Характеристики полимерных углеродосодержащих матриц со стабилизированными в ней ферромагнитными наночастицами для выделенных помещений**

*Радченко Д.П.<sup>1</sup>, Какорина О.А.<sup>1</sup>*

*e-mail: crystal\_steel@bk.ru*

*<sup>1</sup>ФГАОУ ВО «Волгоградский государственный университет», Волгоград, Россия*

С развитием технологий проблема защиты выделенных помещений, используемых для обработки информации составляющей государственную тайну, а также для помещений, в которых ведутся конфиденциальные переговоры является актуальной. Одним из направлений защиты таких помещений является их защита от угроз утечки информации через технические средства передачи информации (ТСПИ) [1]. Для защиты от угроз утечек информации через ТСПИ возможно использовать различные материалы, имеющие в своём составе ферромагнитные наночастицы, ослабляющие электромагнитное поле приборов своим полем обратного направления, создаваемое за счёт вихревых токов, в том числе на основе полимерных углеродосодержащих матриц.

Основными техническими каналами утечки информации являются [2]: Электромагнитные; Параметрические; Виброакустические; Электрические. Среди электромагнитных каналов утечки информации, в которых применимы материалы на основе полимерных углеродосодержащих матриц со стабилизированными в ней ферромагнитными наночастицами, выделяют следующие:

- побочные электромагнитные излучения и наводки (ПЭМИН) ТСПИ;
- электромагнитные излучения на частотах работы ВЧ- генераторов ТСПИ;
- излучения на частотах самовозбуждения усилителей низкой частоты (УНЧ) ТСПИ;
- излучения на частотах работы высокочастотных (ВЧ) генераторов ТСПИ и вспомогательных технических средств и систем (ВТСС).

В настоящее время применяют активные и пассивные методы защиты. Активные методы защиты заключаются в установке различных генераторов, создающих электромагнитное излучение шума в широком диапазоне частот от 0,1 до 2000 МГц [3]. Пассивные методы защиты сводятся к применению экранирования, которое разделяют на электростатическое, магнитостатическое и электромагнитное. Последние два вида экранирования проводят с помощью металлической сетки толщиной от 0,5 до 1,5 мм, которая эффективна для частот свыше 10МГц [4]. Экран из медной сетки 2х2 мм ослабляет сигнал на 30–35 дБ, двойной экран на 50–60 дБ.

Защита информации в выделенном помещении по электромагнитным каналам сводится к защите автоматизированного рабочего места (АРМ). Среди компонентов АРМ наиболее уязвимым и передающим наибольшее количество информации является монитор. В зависимости от частоты кадров интерфейс монитора работает на частотах от 400 МГц до 1.6 ГГц, частота импульса элементарной точки на экране монитора колеблется в диапазоне от 11 до 100 МГц. USB сканер и принтер с интерфейсом 2.0 работает на частоте 480 МГц. Частота работы жёсткого диска колеблется от 0,84 МГц до 240 МГц [5, 6].

Таким образом, для эффективной защиты выделенных помещений можно использовать материалы, имеющие в своём составе полимерные углеродосодержащие матрицы с ферромагнитными наночастицами. Однако, такие материалы должны эффективно ослаблять электромагнитное излучение на 30-35 дБ в диапазоне частот от 11 МГц до 1.6 ГГц.

**Финансирование:** Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства образования и науки РФ (тема "FZUU-2023- 0001").

### **СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ**

1. N.V. Kireeva and A. V. Semenov, Information leakage on PEMIN channels and ways to protect them. *International Journal of Applied and Fundamental Research*, 2016, No. 8–4, pp. 499–504.
2. V.A. Vorona and V. O. Kosensenko, Methods and means of protecting information from leakage through technical channels. *Computational nanotechnology*, vol. 3, pp. 208–223, 2016.
3. The noise generator GS-2500." Accessed: Apr. 13, 2024. [Online]. AVAILABLE: <http://tehzi.ru/gsh-2500.html>
4. G. A. Buzov, S.V. Kalinin, and A. V. Kordratiev, "Protection from information leakage through technical channels". *In a textbook*. M.: Hot Line - Telecom, 2005. Accessed: Apr. 13, 2024. [Online]. AVAILABLE: <https://www.elibrary.ru/item.asp?id=19583821>
5. O. N. Maslov, M. A. Solomatin, and A. D. Vasilievsky, "Test signals for the analysis of PEMIN of personal computers" *Infocommunication technologies*, Vol. 5, no. 2, pp. 79–81, 2007.
6. O. N. Maslov, M. A. Solomatin, and V. D. Ekhrenkov, "Test signals for the analysis of PEMIN of peripheral devices of personal computers" *Infocommunication technologies*, Vol. 5, no. 2, pp. 82–83, 2007.

# **Квантово-химическое моделирование взаимодействий в наноматериалах на основе жидкокристаллических полимеров и полупроводниковых квантовых точек**

*Романова К.А.<sup>1</sup>, Галяметдинов Ю.Г.<sup>1</sup>*

*e-mail: kseniya@mail.ru*

*<sup>1</sup>ФГБОУ ВО «Казанский национальный исследовательский технологический университет», Казань, Россия*

Жидкокристаллические (ЖК) полимеры, помимо склонности к образованию мезофаз и спонтанному упорядочению при определенной температуре или концентрации, проявляют все характерные для полимеров свойства, а именно прочность, эластичность, пленкообразующую способность и важнейшие оптические свойства. Их сочетание с полупроводниковыми квантовыми точками (КТ) можно рассматривать как перспективные многофункциональные наноматериалы для оптоэлектроники и фотоники, благодаря отличительным оптическим свойствам наночастиц и способности жидких кристаллов ориентироваться под действием внешних воздействий.

Излучательные свойства подобных материалов во многом зависят от совокупности свойств входящих в их состав компонентов и характера их взаимодействия. ЖК полимеры способны играть роль стабилизирующей наночастицы среды. Они способствуют сохранению формы и размеров КТ, их целенаправленной локализации и равномерному распределению. Однако оптические свойства нанокompозитов невозможно однозначно предугадать исходя из сочетания свойств наночастиц и анизотропной матрицы. Поэтому прогнозирование и в некоторых случаях интерпретация совершенно новых эффектов и характеристик подобных материалов представляет собой достаточно нетривиальную задачу [1, 2].

В данной работе нами были осуществлены исследования в области квантово-химического расчета молекулярного строения и определения значений энергий синглетных и триплетных возбужденных состояний некоторых ЖК-полимеров, нашедших применение в люминесцентных материалах. Были проделаны расчеты взаимодействий молекулярных образцов полимеров с поверхностными атомами металлов КТ CdSe/CdS. В качестве подхода моделирования был использован метод теории функционала плотности обобщенной градиентной аппроксимации GGA с функционалом PBE и базисом плоских волн в рамках метода сложения проекций плоских волн PAW. По итогам расчетов равновесной геометрии систем были выявлены особенности строения и существенное отклонение геометрических параметров поверхностных слоев КТ от внутреннего ядра.

Была изучена способность ЖК-полимеров выступать в качестве поверхностных агентов для стабилизации морфологии и оптических свойств КТ, произведена оценена эффективность межмолекулярного переноса энергии возбуждения с их участием. Для расчета энергий возбужденных состояний полимеров в виде последовательности трех либо пяти последовательно соединенных мономерных звеньев был использован метод TDDFT и функционал PBE с базисным набором 6-31G(d,p). Изучено влияние природы функциональных групп полимеров на величины энергий образуемых при их координации на поверхности КТ донорно-акцепторных связей.

Люминесценция КТ очень чувствительна к окружающей среде, поскольку большая часть их атомов расположена на поверхности. После фотовозбуждения центры захвата экситонов и дырок могут возникать на неоднородностях поверхности и взаимодействовать с различными тушителями, что существенно влияет на квантовый выход люминесценции. На эффективность излучения КТ также влияют локальные поверхностные напряжения и процесс их пассивации молекулами кислорода, воды или аммиака. Благодаря демонстрируемому полимерами сжимающему напряжению на поверхности КТ и образующимся прочным донорно-акцепторным связям они будут способствовать частицам сохранять морфологию, состояние поверхности и стабильные излучательные характеристики, предотвращать концентрационное тушение и агломерацию.

Для выполнения квантово-химических расчетов были привлечены суперкомпьютеры МВС-10П и МВС-100К «Межведомственного суперкомпьютерного центра РАН». Публикация осуществляется в рамках проекта «Разработка магистерского курса «Инструменты компьютерного моделирования в материаловедении», реализуемого победителем грантового конкурса для преподавателей магистратуры 2023/2024 «Стипендиальная программа Владимира Потанина».

#### **СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ**

1. Романова К.А., Галяметдинов Ю.Г. Теоретическое исследование особенностей свойств квантовых точек "ядро/оболочка/оболочка" CdSe/CdS/ZnS и CdSe/ZnSe/ZnS. *Вестник технологического университета*, 2017, № 18, с. 9-11.
2. Романова К.А., Галяметдинов Ю.Г. Моделирование квантовых состояний квантовых точек "ядро/оболочка" CdSe/CdS и CdSe/ZnS. *Вестник технологического университета*, 2017, № 19, с. 15-17.

# Взаимодействие дисперсной среды на основе дисульфида молибдена с латентными следами рук

Рыбачок Н.С.<sup>1</sup>, Ермакова Т.А.<sup>1</sup>, Васильев В.А.<sup>2</sup>, Какорина О.А.<sup>1</sup>

e-mail: nikitarybachok@mail.ru

<sup>1</sup>ФГБОУ ВО «Волгоградский государственный университет», Волгоград, Россия

<sup>2</sup>Волгоградская академия МВД России, Волгоград, Россия

Для работы со следами рук, подвергшихся воздействию влаги на непористых принято использовать специализированные высокодисперсные среды – SPR-реагенты и их аналоги [1]. Ранее нами экспериментальным путем были разработаны составы новых дисперсных систем для выявления следов рук, подвергшихся воздействию влаги [2]. В состав в качестве диспергируемого вещества входит дисульфид молибдена, а для стабилизации коллоидной системы разработана композиция, содержащая поверхностно-активные вещества [3]. Данный состав позволяет выявлять следы с высоким качеством на большинстве используемых в быту объектах-следоносителях.

В потожировом веществе следа рук содержатся молекулы аминокислот, их концентрация может варьироваться в зависимости от индивидуальных особенностей организма человека. Поэтому исследование механизма взаимодействия потожирового вещества следа с молекулами дисульфида молибдена было изучено на примере молекул серина и гистидина. Проведены квантово-химические расчеты с помощью методов MNDO и DFT. Профили поверхностей потенциальных энергий взаимодействия дисульфида молибдена с аминокислотами показали минимумы, которые подтверждают хемосорбцию дисульфида молибдена с аминокислотами.

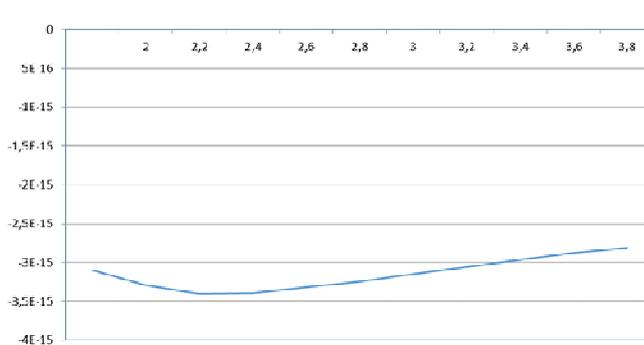


Рис. 1. Профиль поверхности потенциальных энергий взаимодействия молекулы гистидина с дисульфидом молибдена

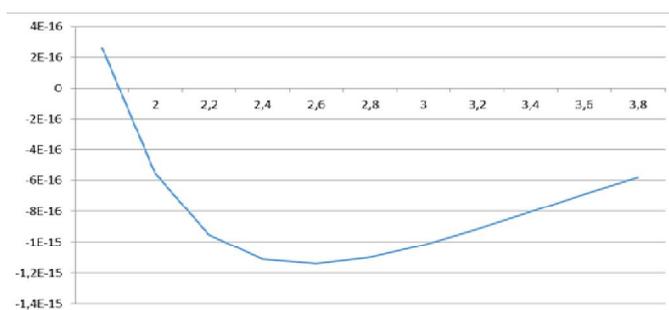


Рис. 2. Профиль поверхности потенциальных энергий взаимодействия молекулы серина с дисульфидом молибдена

Как видно из рисунков 1, 2 профили поверхностей потенциальных энергий взаимодействия дисульфида молибдена с аминокислотами показали минимумы. Это подтверждает хемосорбцию дисульфида молибдена с аминокислотами.

### **СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ**

1. Шелков В.А. SPR – проявитель для выявления следов на влажных поверхностях. *Специальная техника*. 1998. № 3. 67 с.
2. Ермакова Т.А., Васильев В.А., Афанасьев И.Б., Дружинин Ю.А., Юдина Т.Ю., Способ получения дисперсной среды для выявления следов рук, подвергшихся воздействию влаги / Патент РФ № 2699570, А61В5/1172. Опубликовано 06.09.2019. Бюл. № 25.
3. Васильев В.А., Дружинин Ю.А., Афанасьев И.Б., Чешева М.Ф. О некоторых аспектах разработки и применения дисперсной системы для выявления следов рук, подвергшихся воздействию влаги Судебная экспертиза / Forensic examination. Выпуск 3 (67) 2021: научно-практический журнал. – Волгоград : ВА МВД России, 2021. – С. 104–115.

## Разработка метода подбора ИК защитных меток

Стебенькова Н.А.<sup>1</sup>, Стебеньков А.М.<sup>1</sup>

e-mail: [stebenkova@volsu.ru](mailto:stebenkova@volsu.ru)

<sup>1</sup>ФГАОУ ВО «Волгоградский государственный университет», Волгоград, Россия

Предложена процедура расчета инфракрасных защитных меток для маркировки различных изделий от подделок. В частности, важной задачей информационной безопасности является использование лицензионного оборудования с предустановленным программным обеспечением. Если покупатель не может быть уверен в оригинальности покупаемого электронного устройства, то ставится вопрос и о безопасности используемого оборудования. Методика позволяет рассчитать частоты инфракрасного спектра тонких пленок наносимых на поверхности защищаемой продукции. С помощью теории функционала плотности (ТФП) ВЗLYP с расчетным базисом STO-3G рассчитан инфракрасный спектр (ИК-спектр) двумерной ковалентной структуры с локальными дефектами. Проанализированы частоты взаимодействия атома ванадия и кислорода с атомами основной структуры. Также проанализированы электронно-энергетические характеристики рассматриваемых структур.

В качестве объекта исследования были выбраны двумерные тетраэдрические структуры, содержащие 52 атома кремния, оборванные связи замыкались атомами водорода. Модель выбранной двумерной структуры изображена на рисунке 1.

В качестве дефекта был выбран группа .

Оптимизация геометрии и расчет инфракрасных спектров выполнялись с использованием программного пакета Gaussian [2] и вспомогательных программ GaussView [3] и GaussSum. Для оптимизации геометрии и расчета частот применялся метод теории функционала плотности (ТФП) ВЗLYP [4] с базисными наборами Попла STO-3G [5–6]. Исходные длины связей в рассчитываемых структурах задавались в соответствии со средними значениями родственных соединений: ( $R(C-C)=1,54 \text{ \AA}$ ,  $R(C-H)=1,09$ ).

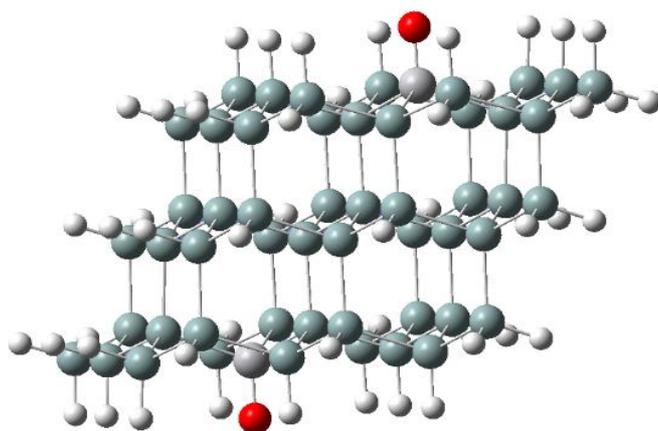


Рис. 1. Двумерная ковалентная структура с локальным дефектом

Предложен способ нанесения стеганографического ИК-рисунка, в котором роль «нуля» будет играть бездефектная структура, а роль «единицы» – область кристалла с локальными дефектами, или наоборот.

## Основные результаты и выводы

Двумерная ковалентная структура была полностью оптимизирована в рамках ТФП. ИК-спектры бездефектной ковалентной структуры и с локальными дефектами на поверхности представлены на рис. 2.

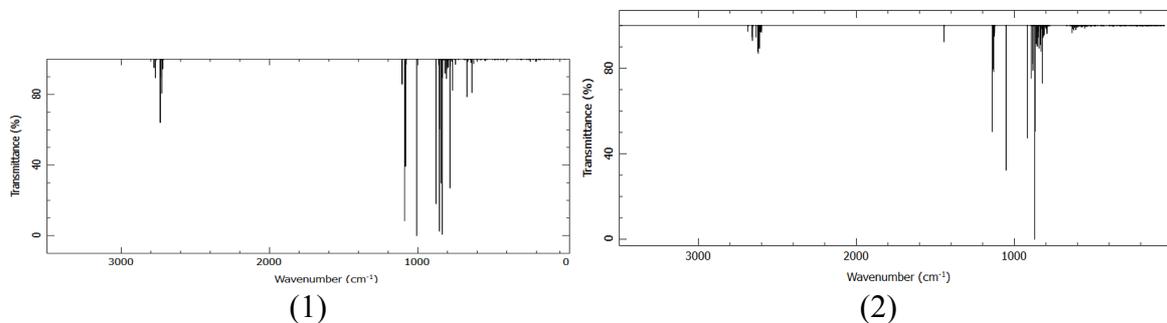


Рис. 2. ИК-спектры бездефектной двумерной ковалентной структуры (1) и с локальным дефектом (2)

1) Анализ спектра на рисунке 2.1 показал колебательные движения атомов в следующих диапазонах длин волн:

- 623-878 см<sup>-1</sup>: вращательные движения связей С-С, коэффициент пропускания до 50%.
- 1006-1106 см<sup>-1</sup>: колебательные движения связей С-Н, коэффициент пропускания до 100%.
- 2719-2778 см<sup>-1</sup>: колебательные движения связей С-Н, коэффициент пропускания до 30%.

2) Анализ спектра на рисунке 2.2 показал колебательные движения атомов в следующих диапазонах длин волн, обусловленные влиянием поверхностных дефектов V=O:

- 79-1145 см<sup>-1</sup>: мощное поглощение, связанное с колебательными и вращательными движениями.
- 1051-1445 см<sup>-1</sup>: вращательные колебания С-Н связей, вызванные дефектными группами.
- 1445-1446 см<sup>-1</sup>: колебательные движения связей V=O, с коэффициентом пропускания около 50%.

При введении локальных поверхностных дефектных групп V=O максимальная интенсивность наблюдается на частоте 870,7см<sup>-1</sup>. Также наблюдается полоса мощного поглощения от 790 до 1145см<sup>-1</sup> (рис. 2.2).

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. P. Kustov, E. Petrova Mie-Resonant Silicon Nanoparticles for Physically Unclonable Anti-Counterfeiting Labels// ACS Appl. Nano Mater/ 2022, 5, 8, 10548–10559
2. Gaussian. Expanding the Limits of Computational Chemistry [Электронный ресурс]. Режим доступа: <http://gaussian.com/>, свободный. яз. англ.

3. Roothan C.C. J. New development in molecular theory// Reviews of Modern Physics/1951. V.23. N 2. P. 69-89. doi:10.1103/RevModPhys.23.69
4. Stewart J.J.P. Optimizations of parameters for semiempirical methods I. Methods // Journal of Computational Chemistry. 1989. V. 10.
5. PKoch, W. A Chemist's Guide to Density Functional Theory / W. Koch, M. C. Holthausen. – 2<sup>nd</sup> edition : Wiley-VCH Verlag GmbH, 2002. – 294 c.
6. W.J. Hehre, R.F. Stewart, J.A. Pople. J. Chem. Phys. **51**, 2657 (1969).

## **Лазерное залечивание нанопор в поверхностном слое нанокристаллического металлического сплава**

*Ушаков А.И.<sup>1</sup>, Сафронов И.С.<sup>1</sup>*

*e-mail: issafronov@yandex.ru*

*<sup>1</sup>ФГАОУ ВО «Национальный исследовательский технологический университет «МИСиС», Москва, Россия*

Износ деталей приводит к снижению точности, прочности машин, приборов и инструментов. Это также снижает КПД машин и увеличивает их шум. Износ является главной причиной выхода из строя машин. Ремонт и замена механического оборудования трудоемко и финансово затратно. Важной причиной износа деталей является разрушение поверхности. Поэтому борьба с износом поверхностного слоя является насущной задачей.

Положительный эффект селективной лазерной обработки поверхности наноматериалов был обнаружен экспериментально [1, 2]. Эти технологии обладают массой преимуществ. Например, установлено одновременное повышение твердости и пластичности поверхностного слоя металлических сплавов.

Однако до сих пор не разработано полноценной теории этого эффекта. Данная теория позволит спрогнозировать новые режимы лазерной обработки. Целью данного исследования является разработка теории селективной лазерной обработки. Задача исследования – проверка гипотезы о том, что причиной эффекта повышения механических свойств поверхности нанокристаллических металлических сплавов является заживление приповерхностных нанодефектов под действием лазерной плазмы.

Нанопора является распространенным дефектом. Поэтому было исследовано её залечивание. Поскольку современная техника не позволяет проводить такие эксперименты в режиме реального времени, было проведено компьютерное моделирование. В качестве критериев достоверности полученных результатов принимали: непротиворечивость теоретических представлений и их соответствие современным физическим теориям, а также точность прогнозов.

На основании общих физических представлений решающую роль в механизме заживления дефекта играет тепловое поле. Потому что, если мы не будем принимать во внимание анизотропию теплового поля, то из соображений симметрии процесс залечивания поры должен проходить симметрично. Но анизотропия теплового поля обеспечивает различные значения свойств материала вокруг поры. Это обеспечивает сложную схему залечивания поры. Изучение особенностей этого процесса очень важно. Потому что это позволит определить наиболее благоприятную ситуацию для залечивания поры.

С повышением температуры сопротивление деформации металла уменьшается. Следовательно, более горячий материал деформируется активнее. Данное предположение было подтверждено моделированием. Более горячий металлический материал является слабым местом с точки зрения стабильности пор. В ходе исследования было найдено характерное тепловое поле и определена схема залечивания нанопоры.

### **СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ**

1. Ушаков И.В., Ошоров А.Д., Сафронов И.С. Физика деформирования и разрушения на границе аморфного и кристаллического металлического сплава. *Доклады Академии наук высшей школы Российской Федерации*. 2023. Т. 59. № 2. С. 7–15.
2. Ушаков И.В., Сафронов И.С., Ошоров А.Д., Wang Zhiqiang, Муромцев Д.Ю. Физика воздействия высокотемпературного импульсного нагрева на дефекты в поверхностном слое металлического сплава. *Металлург*. 2023. № 7. С. 74–79.

# **Исследование возможности создания композитов на основе биополимера, армированного углеродными нанотрубками, для использования их в протезировании**

*Тимникова В.А.<sup>1</sup>, Запороцкова И.В.<sup>1</sup>*

*e-mail: nim-231\_365195@volsu.ru*

*<sup>1</sup>ФГАОУ ВО «Волгоградский государственный университет», Волгоград, Россия*

В данной работе представлены результаты исследования возможности создания композитов на основе биополимера полиэфирэфиркетона (ПЕЕК), армированного углеродными нанотрубками, для использования их в качестве материала протезов, которые могут быть изготовлены с помощью 3D печати. Материал получается путем введения в матрицу полимерного композиционного материала (ПКМ) углеродных нанотрубок (УНТ). Был смоделирован и изучен процесс взаимодействия однослойной углеродной нанотрубки (6, 6) с мономером полиэфиркетона ПЕЕК. Изучено одноцентровое и двухцентровое взаимодействия. Расчеты были выполнены в рамках квантово-химического метода DFT с различными базисными наборами. Определены основные параметры взаимодействия и доказана возможность реализации модифицирования полимера нанотрубками, что может послужить стимулом для создания нового материала, который будет обладать новыми уникальными свойствами, для создания в дальнейшем долговечных протезов конечностей.

В России последние 20 лет спрос на протезы увеличился: ими пользуются почти полмиллиона человек, ежегодно проводится порядка 70 тыс. операций. Протезы полностью заменяют части тела, ампутированные в результате травмы или отсутствующие в результате врожденных дефектов. Средний срок службы протеза у взрослого человека пять лет, однако детям замена протеза требуется чаще [1]. Протезы бывают разного вида, например, которые внешне выглядят приближённо к утерянной конечности-косметические протезы, и физические – это активные изделия, частично заменяющие функцию утраченной конечности. Существенно важными являются миоэлектрические протезы с внешним источником питания, а также механические протезы, изготавливаемые без электрики и так далее [2]. В нынешнее современное время есть множество способов получения протезов, однако более перспективной в настоящее время является идея создания протеза путем 3D-печати. Такой метод позволит управлять анизотропией материала в различных слоях и участках за счет контроля толщины нити полимера, ее кривизны и направления. Подобное рассмотрение делает взгляд на возможность оптимизации энергетической эффективности протеза, а также распределение механического напряжения, лежащего в основе долговечности изделия. Речь заходит и новой идеи перспективы использования технологии 3D-печати, дальнейшая экстраполяция которой на микроразмерный уровень способна в корне изменить концепцию использования материалов в медицинских задачах в целом [3].

Одними из современных и основных материалов для протезирования являются полимеры [4]. В настоящее время при проектировании и производстве протезов чаще используют полиэфирэфиркетоны (ПЕЕК) и полиамидимиды (Torlon), которые обладают превосходной жесткостью и прочностью [5]. Их особенность заключается в том, что они

могут быть модифицированы наполнителями для улучшения их и без того впечатляющих свойств. В следствие такого процесса является улучшение износостойкости материалов, поэтому компоненты протезов остаются прочными и жизнеспособными в течении многих лет эксплуатации. Однако один из полимеров-Torlon представляет собой пленочную жидкость, которая окутывает изделие, поэтому он не подходит для 3D производства. В свою очередь РЕЕК имеет вид бесцветного термопластичного полимер. Одна из важных особенностей данного полимера заключаться в том, что он выдерживает высокие эксплуатационные температурные нагрузки от -400С до 2600С [6]. Не мало важно его характеристикой будет высокий предел прочности при растяжении и предел выносливости при изгибе, которые постоянны даже при воздействии высоких температур и химических веществ, делают этот полимер незаменимым во многих конструкциях, требующих повышенных характеристик материала. По мимо и без того впечатляющих свойств полимер РЕЕК обладает небольшой усадкой, не возгорается и обладает низкой воспламеняемостью. Поэтому для наших исследований мы будем рассматривать именно полиэфирэфиркетон.

Структурная формула мономера РЕЕК представлена на рисунке 1.

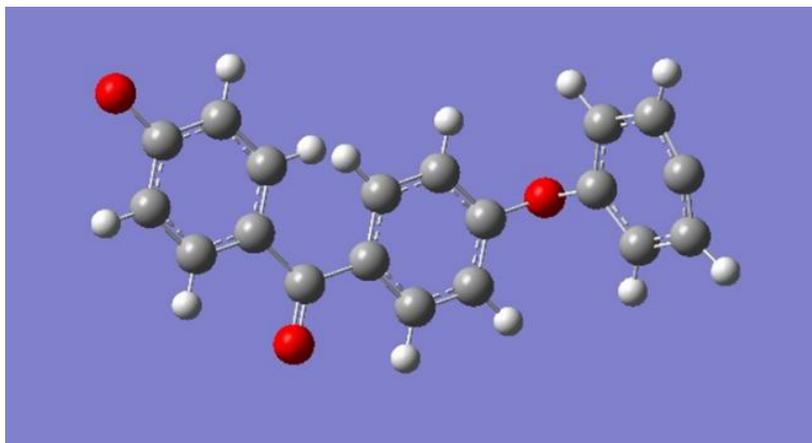


Рис. 1. Структурная формула мономера РЕЕК

Одним из способов получения конструктивных материалов является способ введения в матрицу полимерного композиционного материала (ПКМ) углеродных нанотрубок (УНТ), которые, обладая уникальными физико-химическими свойствами, модифицируют полимер-матрицу для дальнейшего использования в изделиях специального назначения [7, 8].

### **Исследовательская часть**

Для доказательства возможности использования УНТ для улучшения характеристик РЕЕК, необходимо исследовать процесс взаимодействия УНТ с полиэфиркетон. Этот процесс взаимодействия имеет вид: мономера с поверхностью углеродной нанотрубки типа (6,6). Модели такого взаимодействия изображена на рис. 2. По мимо этого было исследовано так называемое двухцентровое взаимодействие двух мономеров РЕЕК с поверхностью однослойной нанотрубки (рис. 3), когда два мономера присоединялись к поверхности нанотрубки с двух противоположных сторон.

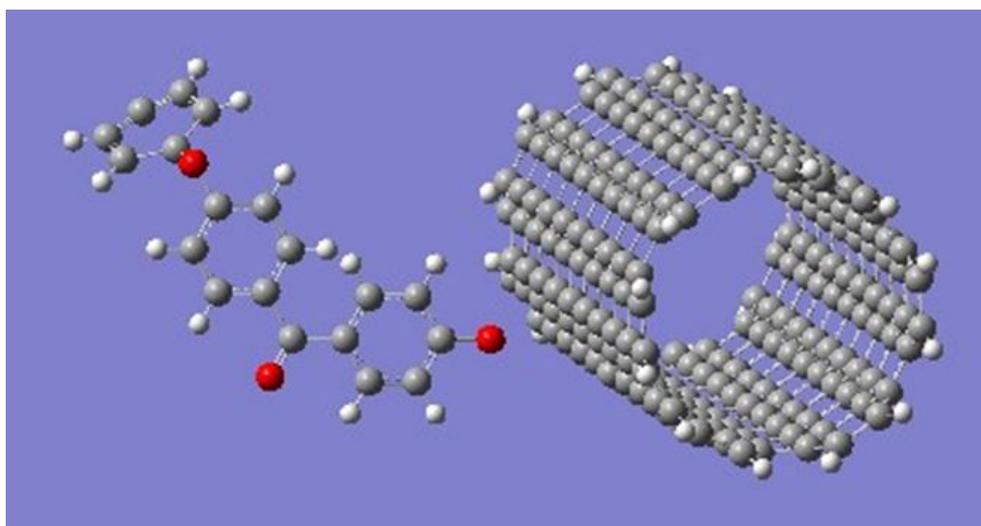


Рис. 2. Модель взаимодействия мономера полиэфирэфиркетона с УНТ

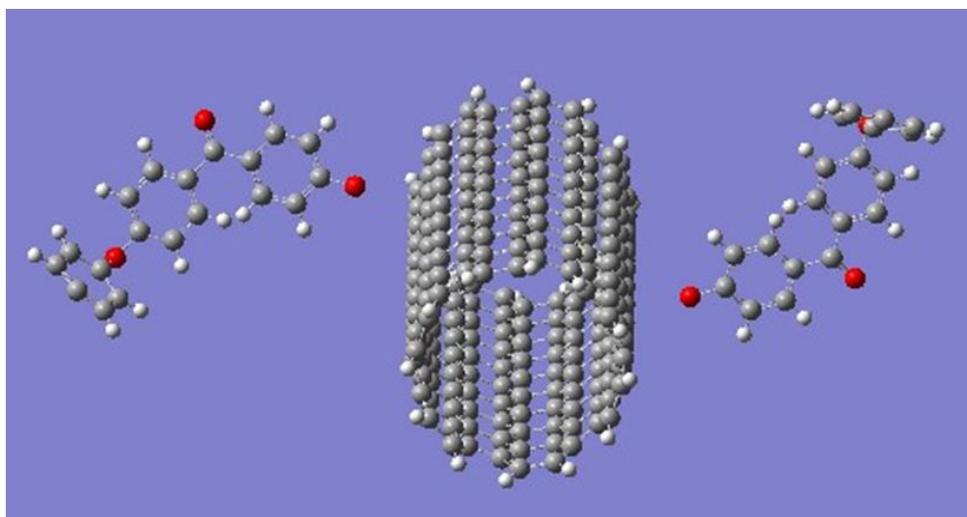


Рис. 3. Модель двухцентрового взаимодействия двух мономеров РЕЕК с УНТ

Был применен молекулярный кластер однослойной углеродной нанотрубки типа (6, 6), который состоит из 240 атомов углерода, границы которого замыкались псевдоатомами, в качестве которых были использованы атомы водорода. Присоединение моделировалось последовательным приближением с шагом 0,1 Å мономера (или фрагмента) РЕЕК к выбранному атому поверхности углеродной нанотрубки, находящемуся примерно в середине молекулярного кластера УНТ для того, чтобы избежать влияние граничных псевдоатомов. Расчеты были проведены в рамках квантово-химического метода теории функционала плотности с различными базисными наборами. Для взаимодействия мономера РЕЕК с углеродной нанотрубкой был использован базисный набор 6-31G [9]. Для двухцентрового взаимодействия был применен более простой базисный набор 3-21G [10].

В результате были получены и построены энергетические кривые взаимодействия, анализ которых позволил определить основные параметры взаимодействия – расстояния и энергии, соответствующие энергетическому минимуму на кривых. Кривые представлены на рис. 4 и 5.

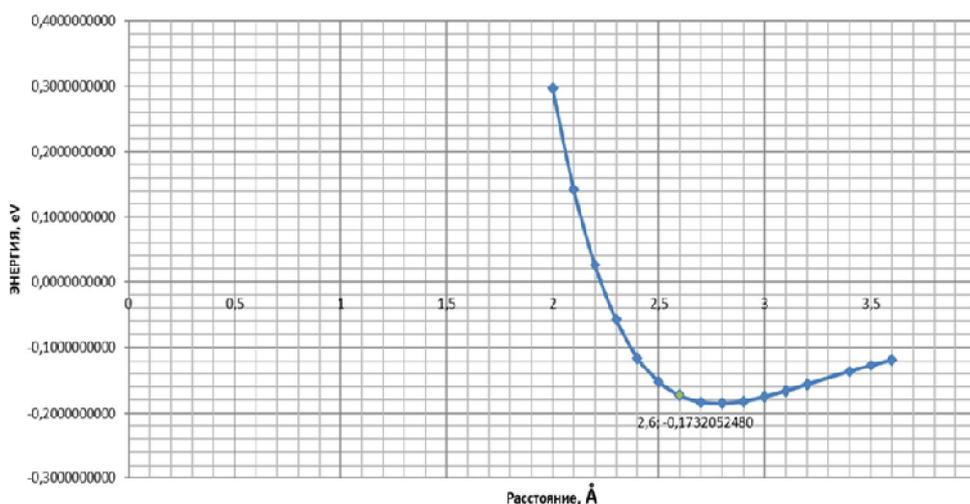


Рис. 4. Зависимость потенциальной энергии взаимодействия мономера РЕЕК с УНТ

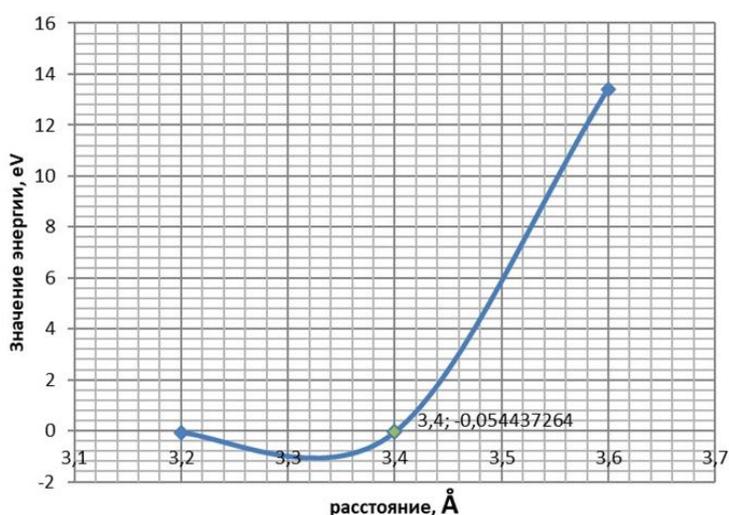


Рис. 5. Зависимость потенциальной энергии взаимодействия двухцентрового взаимо-действия двух мономеров РЕЕК с УНТ

Далее было проанализировано зарядовое распределение в системе взаимодействия мономера полиэфиркетона с УНТ. Установлено, что в результате взаимодействия электронная плотность перешла от атома кислорода мономера к атому углерода нанотрубки, на который был ориентирован мономер. Значения зарядов приведены в таблице 1. Также было проанализировано зарядовое распределение в системе двухцентрового взаимодействия двух мономеров РЕЕК с поверхностью однослойной нанотрубки и обнаружен факт переноса электронной плотности от атома кислорода мономера к атому углерода поверхности УНТ, к которому происходило присоединение второго мономера РЕЕК (табл. 2).

Таблица 1. Результаты исследования взаимодействия мономера полиэфиркетона с УНТ

Энергия взаимодействия, эВ	-0,17
Расстояние, Å	2,6
Заряд на атоме С нанотрубки до взаимодействия	-0,0009
Заряд на атоме О мономера до взаимодействия	-0,7359
Заряд на атоме О мономера при взаимодействии	-0,6009
Заряд на атоме С нанотрубки при взаимодействии	0,1812

Таблица 2. Основные параметры и характеристики двухцентрового взаимодействия УНТ с мономерами РЕЕК

Энергия взаимодействия, эВ	-0,05
Расстояние, Å	3,4
Заряд на атоме С нанотрубки до взаимодействия	-0,7359
Заряд на атоме О до взаимодействия	-0,0003
Заряд на атоме О после взаимодействия	-0,4703
Заряд на атоме С после взаимодействия	0,0344

Анализ электронно-энергетического состояния системах взаимодействия мономера полиэфирэфиркетона с УНТ и двухцентрового взаимодействия двух мономеров РЕЕК с поверхностью однослойной нанотрубки позволил определить ширину запрещённых зон, которые оказалась равной 0,01 эВ. Полученное значение характеризует системы как узкозонные полупроводники.

Анализ зарядового перераспределения обнаружил, что присоединение мономера вызывает зарядовое возмущение, что приводит к появлению ненулевых зарядов на атомах углерода, причем это возмущение в системе взаимодействия мономера полиэфирэфиркетона с УНТ до вторых соседей выбранного атома С. Сравнительная таблица зарядов – таблица 3. Анализ зарядового перераспределения в системе двухцентрового взаимодействия двух мономеров РЕЕК с поверхностью однослойной нанотрубки также выявил возмущение, которое распространяется до сферы второго ближайшего к выбранному атому углерода соседа, представлено в таблице 4.

Таблица 3. Зарядовое перераспределение на атомах углерода УНТ до и после взаимодействия с мономером РЕЕК (ближайшие соседи выбранного атома углерода; цветом выделен атом С, к которому присоединялся мономер)

Элемент	Значение заряда до взаимодействия, Кл/м <sup>3</sup>	Значения заряда при взаимодействии, Кл/м <sup>3</sup>
С	-0,0002	-0,0021
С	-0,0009	-0,0020
С	-0,0004	0,0067
С	-0,0002	0,0344
С	-0,0012	0,0127
С	-0,0004	0,0082
С	-0,0003	0,0016
С	-0,0008	0,0008
С	-0,0009	0,0019
С	-0,0009	-0,0006
С	-0,0007	-0,0005
С	-0,0003	0,0021
С	-0,0013	-0,0006
С	-0,0004	0,0126
С	-0,0011	0,0081
С	-0,0005	0,0014

Таблица 4. Таблица сравнения зарядов на атомах углерода до второй сферы соседей до и после взаимодействия со вторым мономером РЕЕК

Элемент	Значение заряда до взаимодействия, Кл/м <sup>3</sup>	Значения заряда при взаимодействии, Кл/м <sup>3</sup>
C	-0,0002	-0,0021
C	-0,0009	-0,0020
C	-0,0004	0,0067
C	-0,0002	0,0344
C	-0,0012	0,0127
C	-0,0004	0,0082
C	-0,0003	0,0016
C	-0,0008	0,0008
C	-0,0009	0,0019
C	-0,0009	-0,0006
C	-0,0007	-0,0005
C	-0,0003	0,0021
C	-0,0013	-0,0006
C	-0,0004	0,0126
C	-0,0011	0,0081
C	-0,0005	0,0014

#### **Выводы:**

1. Наличие минимума на кривых доказывает возможность взаимодействия полиэфиркетона с углеродными нанотрубками, что может послужить стимулом для создания полимера, модифицированного УНТ, для использования его в практике протезирования, который будет обладать новыми улучшенными свойствами. Такой материал будет служить дольше и его будет проще подстроить под характеристики и параметры утерянной конечности.

2. Проанализировано зарядовое перераспределение в системах "УНТ + мономер РЕЕК" и "УНТ+мономер РЕЕК + мономер РЕЕК" и обнаружено, что во всех случаях происходит перенос электронной плотности от атома кислорода мономеров к атомам углерода поверхности нанотрубки, к которым присоединяются мономеры, причем зарядовое возмущение распространяется на атомы углерода нанотрубки вплоть до сферы вторых ближайших соседей по отношению к выбранным атомам С.

3. Анализ электронно-энергетического строения систем с одно- и двухцентровым взаимодействием с мономерами РЕЕК обнаружил, что по типу проводимости обе системы относятся к узкозонным полупроводникам с шириной запрещенной щели 0,01 эВ.

**Финансирование:** Работа выполнена в рамках государственного задания Министерства науки и высшего образования РФ (тема "FZUU-2023-0001).

#### **СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ**

1. Общество «Сделано на коленке». Какое будущее ожидает протезирование конечностей в России [Электронный ресурс]- URL: <https://spid.center/ru/articles/4595>.

2. «СалютОрто» центр протезирования и ортопедии. Какими бывают протезы – виды протезов рук и ног [Электронный ресурс]- URL: <https://salut-orto.ru/blog/kakimi-byvayut-protezy/>

3. Резцова М.А., Овчаренко Е.А., Полимерные протезы клапанов сердца: состояние и перспективы [Электронный ресурс] // ФГБНУ «Научно-исследовательский институт комплексных проблем сердечно-сосудистых заболеваний», Кемерово, Российская Федерация- URL: <https://journal.transpl.ru/vtio/article/viewFile/888/715>
4. Радионов В.В., канд. физ.-мат., с.н.с. РЦН Мякишев А.М., Обзор применений углеродных нанотрубок в полимерных композиционных материалах // Юго-Западный государственный университет, г. Курск, Россия. [Электронный ресурс]- URL: <https://cyberleninka.ru/article/n/obzor-primeneniy-uglerodnyh-nanotrubok-v-polimernyh-kompozitsionnyh-materialah/viewer>.
5. Genesis Medical Plastics ISO 134885:2016 How can PEEK and Torlon enhance the capabilities of prosthetics? [Электронный ресурс]- URL: <https://www.genesismedicalplastics.com/markets-and-applications/prosthesis/>
6. Picaso 3D Community PICASO Designer X - как печатать PEEK? [Электронный ресурс]- URL: <https://picaso3d-club.ru/blog/picaso-designer-x-kak-pechatat-peek/>
7. Павлов, П. В. Физика твердого тела / П. В. Павлов, А. Ф. Хохлов. – М.: Высшая школа, 1985. – 494 с.
8. Левин, А. А. Введение в квантовую химию твердого тела / А. А. Левин. – М.: Химия, 1974. – 240 с.
9. Studbooks.net Валентно-расщепленные базисные наборы [Электронный ресурс]- URL: [https://studbooks.net/2287556/matematika\\_himiya\\_fizika/valentno\\_rasscheplennye\\_bazisnye\\_nabory](https://studbooks.net/2287556/matematika_himiya_fizika/valentno_rasscheplennye_bazisnye_nabory)
10. Хурсан- Лекции по квантовой механике и квантовой химии, Дальнейшее улучшение базисных наборов [Электронный ресурс] // Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева. – URL: <file:///C:/Users/Home/Downloads/13Lecture-12.pdf>

## Связанные квантовые мемристоры для нейроморфных систем

Форш П.А.<sup>1,2</sup>, Стремоухов С.Ю.<sup>1,2</sup>, Хабарова К.Ю.<sup>2</sup>, Колачевский Н.Н.<sup>2</sup>

*e-mail: phorsh@mail.ru*

<sup>1</sup>ФГБОУ ВО Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, физический факультет, Москва, Россия

<sup>2</sup>ФГБУН Физический институт имени П.Н. Лебедева Российской академии наук, Москва, Россия

Термин "мемристор" был введен в начале 1970-х годов в оригинальной статье Л. Чуа [1]. Основное свойство мемристора заключается в том, что его сопротивление зависит от протекшего заряда, следовательно, это устройство сохраняет память о прошлых состояниях. Работа Чуа оставалась в основном незамеченной до 2008 года, пока Д. Струков с коллегами [2] не сообщил об экспериментальной реализации мемристора, которая вызвала огромный интерес среди ученых. Фактически, было быстро понято, что мемристоры потенциально могут произвести революцию в электронике, позволяя хранить информацию без источника питания и выполнять логические операции [3], а также имитировать поведение нейронных синапсов [4].

Все созданные и исследованные на данный момент мемристоры в основном являются классическими, т.е. подчиняются законам классической физики. Возникает закономерный вопрос о возможности создания мемристивного устройства, которое обладает подлинно квантовым поведением, позволяющим осуществлять манипулирование квантовой информацией. В силу сложившейся тенденции такое устройство называют квантовым мемристором. Квантовый мемристор должен демонстрировать «мемристивное поведение» для математических ожиданий квантовых наблюдаемых и иметь способность когерентно отображать квантовое входное состояние на выходное состояние.

К настоящему моменту направление развития квантовых мемристоров и их использования в нейроморфных вычислениях находится еще в зачаточной стадии. Концепция квантового мемристора была введена Пфайффером и др. [5]. Были изучены различные квантовые платформы для реализации этой идеи, например, сверхпроводящие схемы [6] и квантовая фотоника [7–9].

В то же время квантовый мемристор на захваченных ионах, которые имеют очень хорошие перспективы в квантовых вычислениях, практически не изучался. Однако именно такой мемристор может иметь ряд преимуществ по сравнению с аналогами на других платформах за счет наличия достаточно большого количества ионных уровней с различным временем жизни и переходов с различной «силой осциллятора», а также возможности использования связанных состояний ионов.

В рамках данной работы предложена концепция квантового мемристора на основе ультрахолодных ионов, захваченных в ловушки Пауля. Показано, что при определенных значениях параметров лазерных импульсов, которые обеспечивают движение населенности выделенных уровней иона, осуществляется «мемристивная зависимость» выходного сигнала от входного. Предложено два варианта создания квантового мемристора: на одиночном ультрахолодном ионе и на цепочке связанных низкочастотной колебательной модой центра масс ультрахолодных ионов. В последнем случае используются два и более ионов. Для этого, в отличие от манипуляций с одним ионом,

создается линейная ловушка Пауля, в которой ионы кристаллизуются, располагаясь вдоль оси ловушки, там, где амплитуда радиочастотного поля обращается в ноль. За счет кулоновского отталкивания между ионами в такой системе возникает низкочастотная колебательная мода центра масс. Это существенно расширяет возможности кодирования информации в такой системе и делает подобные связанные квантовые мемристоры перспективными с точки зрения использования в нейроморфных вычислениях.

**Финансирование:** Работа выполнена в рамках гранта РФФИ № 24-12-00415.

### **СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ**

1. Chua L. Memristor—the missing circuit element. *IEEE Trans. Circuit Theory*, 1971, vol. 18, pp. 507–519.
2. Strukov D. B., Snider G. S., Stewart D. R., Williams, R. S. The missing memristor found. *Nature*, 2008, vol. 453, pp. 80–83.
3. Borghetti J. et al. ‘Memristive’ switches enable ‘stateful’ logic operations via material implication. *Nature*, 2010, vol. 464, pp. 873–876.
4. Alibart F. et al. An organic nanoparticle transistor behaving as a biological spiking synapse. *Adv. Funct. Mater*, 2010, vol. 20, pp. 330–337.
5. Pfeifer P., Egusquiza I. L., Di Ventra M., Sanz M., Solano, E. Quantum memristors. *Scientific Reports*, 2016, vol. 6, p. 29507.
6. Salmilehto J., Deppe F., Di Ventra M., Sanz M., Solano E. Quantum memristors with superconducting circuits. *Sci. Rep.*, 2017, vol. 7, p. 42044.
7. Sanz M., Lamata L. Solano E. Invited Article: Quantum memristors in quantum photonics. *APL Photonics*, 2018, vol. 3, p. 080801.
8. Gonzalez-Raya T., Lukens J.M., Céleri L.C., Sanz M. Quantum Memristors in Frequency-Entangled Optical Fields. *Materials*, 2020, vol. 13, p. 864.
9. Spagnolo M. et al. Experimental photonic quantum memristor. *Nature Photonics*, 2022, vol. 16, pp. 318–323.

# Влияние углеродных нанотрубок на механические свойства композита на основе нанокристаллического сплава 5БДСР

Хозром И.М.<sup>1</sup>, Ошоров А.Д.<sup>1</sup>

*e-mail: iyadhosrom2015@gmail.com*

<sup>1</sup>ФГАОУ ВО «Университет науки и технологий МИСиС», Москва, Россия

Нанокристаллические металлические сплавы обладают уникальными физико-механическими свойствами. Они нашли широкое применение как магнитомягкого материала в проектах силовой электроники. При этом, по сравнению с кристаллическими металлическими сплавами, нанокристаллические металлические сплавы характеризуются высокой твердостью, прочностью и коррозионностойкостью [1]. Одним из главных недостатков является трудоемкость получения объемных нанокристаллических сплавов, что ограничивает их применение в качестве элемента конструкции. Поэтому создание композитов на основе таких сплавов является актуальной задачей физики и материаловедения. Также возможно улучшение композита добавлением в матрицу ультрадисперсных структур в виде углеродных нанотрубок (УНТ). Целью данной работы, является выявление влияния УНТ на прочностные свойства композита на основе нанокристаллического металлического сплава.

Для подготовки образцов композита был выбран нанокристаллический сплав в виде ленты торговой марки 5БДСР. Химический состав ленты 5БДСР 77% Fe + 1% Cu+3Nb+13%Si+3% В (вес. %) толщина составляет 30 мкм, а ширина 25 мм, лента произведена на Ашинском металлургическом заводе. В качестве матрицы композита служила паяльная паста торговой марки SD-318. Химический состав: 63% Sn + 37 % Pb (вес. %), точка плавления 183 °С, размер частиц 25–45 мкм, вязкость 200 Па. Были подготовлены две серии образцов композитов с УНТ и без УНТ. В качестве УНТ брали углеродный многослойный наноструктурный материал (Таунит-М), продукт CVD синтеза ООО «НаноТехЦентр».

Алгоритм подготовки образцов композита включает в себя два этапа. Первый этап: паяльная паста наносится на лицевой поверхности одной ленты и вторая лента накладывается на паяльную пасту обратной поверхностью. На втором этапе: подготовленный «сэндвич» из двух лент и паяльной пасты, размещается в печь под механическим прессом для обеспечения надежного соединения. Температура в печи 250 °С, время выдержки 2 минуты, после чего образец охлаждается при комнатной температуре. При подготовке композитов с УНТ они добавляются в паяльную пасту и равномерно распределяются по всему объему. Процентное соотношение припоя и УНТ составляет 0.2 % Таунит-М + 99.8 % SD-318.

Готовые образцы были подвергнуты одноосному растяжению на универсальной испытательной машине Instron 3365 при комнатной температуре, скорость деформации составила 0.1 мм/с. Результаты испытания приведены в таблице 1. Использование УНТ в композиционных материалах привело к существенному улучшению механических свойств. Предел прочности образцов с УНТ в среднем достиг 745 МПа, в то время как образцы без УНТ показали средний предел прочности в 518 МПа. Аналогично, деформация при растяжении увеличилась с 1.6% для образцов без УНТ до 2.5 % для образцов с УНТ. На рисунке 1 приведена диаграмма растяжения образцов двух серий.

Таблица 1. Результаты испытания композитов

№	Предел прочности, МПа	Деформация, %
Образцы без УНТ	518	1,67
Образцы с УНТ	745	2.5

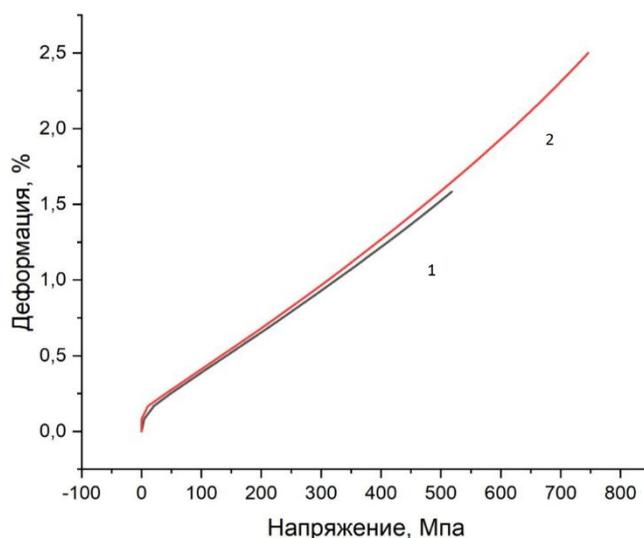


Рис. 1. Диаграмма растяжения композитов: 1 - образцы без УНТ, 2 - с УНТ

Процесс разрушения композита начинается с формирования микротрещин в областях локальных напряжений [2]. Под воздействием внешних нагрузок происходит рост магистральной трещины, которая в итоге приводит к разрушению образца [3, 5]. Однако наличие УНТ препятствует распространению этих трещин. УНТ способствуют блокированию путей распространения трещин увеличивая общую энергию, необходимую для разрушения композита, тем самым позволяя композиту выдерживать большие напряжения и деформации перед разрушением (рис. 1). Эти результаты свидетельствуют о значительном усилении структуры композита за счет добавления УНТ, что обеспечивает более высокую устойчивость к механическим нагрузкам.

### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Судзуки К., Худзимори Х., Хасимото К. *Аморфные металлы* [Под ред. Масумото Ц. Пер. с япон.] М.: Металлургия, 1987. 328 с.
2. Мильман Ю. В., Козырев Д. В. О механизмах деформации в аморфных металлических сплавах. *Известия высших учебных заведений. Черная Металлургия*. 2014. Т. 57. № 8. С. 50-55.
3. Ушаков И. В., Ошоров А. Д. Микроразрушение многослойного композита на основе аморфно-нанокристаллического металлического сплава. *Вестник Московского авиационного института*. 2022. Т. 29. № 3. С. 246-252.
4. ГОСТ 1497-84. Металлы. Методы испытаний на растяжение. – М.: Издательство стандартов, 1986. 22 с.
5. J. Verduzco., I. Betancourt., F. Saavedra., E. Reynoso Mechanical properties of amorphous Fe-based melt spun ribbons with Cr additions. *Journal of Non-Crystalline Solids*. V. 329, Is. 1–3, 2003, pp. 163-166.

# Исследование физико-механических характеристик эпоксидных композитов, модифицированных силанизированными углеродными наноструктурами

Хробак А.В.<sup>1</sup>, Дьячкова Т.П.<sup>1</sup>, Язубов В.С.<sup>1</sup>, Титов Г.А.<sup>1</sup>

*e-mail: nastiarx@yandex.ru*

<sup>1</sup>ФГБОУ ВО "Тамбовский государственный технический университет", Тамбов, Россия

Композиционные материалы с высокими физико-механическими характеристиками и малым удельным весом весьма востребованы в машиностроении, авиакосмической отрасли и строительстве. Регулируемых положительных эффектов при создании таких композитов удается достичь при использовании наноматериалов в качестве наполнителей.

Например, углеродные наноструктуры (УНС), обладающие значительными показателями предела прочности и модуля упругости при различных типах механических нагрузок, часто используются в качестве армирующих добавок в эпоксидные смолы. Кроме того, УНС должны способствовать улучшению тепло- и электропроводности, а также термической стабильности композиционных материалов. Однако из-за явлений агломерации при введении углеродных нанотрубок (УНТ) и графеновых материалов в полимер реальные значения механических и электрофизических характеристики композитов оказываются значительно меньше ожидаемых. Традиционно для решения этой проблемы УНТ и другие типы УНС подвергают функционализации, благодаря которой усиливается их межфазное взаимодействие с полимерной матрицей, а распределение становится более равномерным. В частности, прививка к поверхности УНТ фрагментов молекул различных аminosиланов способствует улучшению совместимости с эпоксидными смолами [1]. Кроме того, в настоящее время в составе композитов часто используют гибридные наполнители на основе смесей различных типов УНС, которые демонстрируют синергетическое усиление эффектов друг друга [2].

В рамках настоящего исследования было проанализировано влияние функционализированных аminosиланами углеродных нанотрубок и смешанных наполнителей «УНТ-оксид графена (ОГ)» и «УНТ-графеновые нанопластины (ГНП)» на физико-механические характеристики нанокомпозитов на основе эпоксидной смолы. Исходными материалами являлись УНТ «Таунит-М», оксид графена и малослойные ГНП «Таунит-ГМ» производства ООО «Нанотехцентр» (г. Тамбов, Россия). В качестве силанизирующих реагентов использованы: 1) аминопропилтриэтоксисилан (APTES); 2) 3-глицидоксипропилтриэтоксисилан (GPTEES). Силанизации подвергались исходные и предварительно окисленные концентрированной азотной кислотой в течение 5 часов УНТ, а также гибридные материалы «УНТ-ОГ» и «УНТ-ГНП» с массовым соотношением компонентов от 1:1 до 1:4. Немодифицированные и силанизированные УНС (0,2 масс. %) вводились в эпоксидную смолу «ЭД-22» с помощью трехвалковой мельницы «ЕХАКТ», после чего модифицированное связующее подвергалось отверждению по стандартной методике.

Прочностные характеристики полученных нанокомпозитов при изгибных и разрывных нагрузках определялись на испытательной машине «Testometric M350-5AT».

На основании данных, представленных в таблице 1 данных можно сделать выводы об армирующем действии УНС на эпоксидное связующее и более существенное повышение прочностных характеристик за счет модифицирования при разрывных нагрузках. Силанизация предварительно окисленных УНТ способствует получению более эффективного наномодификатора за счет образования ковалентных связей между фенольными группами нанотрубок и силанольными группами аминсиланов. GPTES в качестве силанизирующего реагента предпочтительнее, чем АРТЕС. Применение силанизированного АРТЕС гибридного наполнителя «УНТ-ОГ» (1:4) способствует повышению предела прочности при разрыве на 83%, однако композит становится существенно более эластичным, чем немодифицированный материал, на что указывает заметный рост относительной деформации при разрушении. УНС, функционализированные GPTES, напротив, способствуют некоторому снижению показателей деформации при росте прочностных характеристик.

Таблица 1. Прочностные характеристики эпоксидных нанокомпозитов

УНС	Силанизирующий агент	Тип нагрузки					
		Изгиб			Разрыв		
		Предел прочности, МПа	Модуль упругости, МПа	Отн. деформация, %	Модуль Юнга, МПа	Предел прочности, МПа	Отн. деформация, %
Контрольный образец		121	2903	4,95	685	43,5	5,76
УНТ	-	130	3188	4,87	734	71,0	10,25
УНТ	АРТЕС	130	2960	5,39	611	78,3	13,86
окисл. УНТ	АРТЕС	137	2944	5,72	727	79,2	12,50
УНТ	GPTES	104	2838	4,27	727	47,3	5,47
окисл. УНТ	GPTES	120	2790	5,17	751	42,6	4,89
«УНТ-ГНП» (1:4)	АРТЕС	110	2815	4,66	690	41,4	5,10
«УНТ-ОГ» (1:4)	АРТЕС	122	2998	4,79	709	79,6	12,57

На следующем этапе исследования планируется получить гибридные наполнители силанизированные GPTES и оценить их влияние на физико-механические свойства эпоксидных композитов. Кроме того, будет произведена оценка температуропроводности нанокомпозитов различных составов и их термической стабильности. Однако уже на основании полученных данных можно сделать предварительные выводы о целесообразности применения силанизированных УНС в качестве наномодификаторов эпоксидных смол.

### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Mozaffarinasab, H., Jamshidi M. Surface modification of carbon nanotubes by a bifunctional amine silane; effects on physical/mechanical/thermal properties of epoxy nanocomposite. *Progress in Organic Coatings*, 2023, vol. 179, pp. 107521.
2. Dyachkova, T.P.; Khan, Y.A.; Burakova, E.A.; Galunin, E.V.; Shigabaeva, G.N.; Stolbov, D.N.; Titov, G.A.; Chapakov, N.A.; Tkachev, A.G. Characteristics of Epoxy Composites Containing Carbon Nanotubes/Graphene Mixtures. *Polymers* 2023, vol. 15, pp. 1476.

# **Зависимость пористости технического углерода, полученного плазмохимической обработкой углеводородов, от природы сырья**

*Шахназарова А.Б.<sup>1</sup>, Волкова М.Р.<sup>1,2</sup>, Горина В.А.<sup>1</sup>, Данилов Е.А.<sup>1</sup>*

*e-mail: ABShakhnazarova@rosatom.ru*

*<sup>1</sup>АО «НИИГрафит», Москва, Россия*

*<sup>2</sup>ФГАОУ ВО «РХТУ им. Д.И. Менделеева», Москва, Россия*

Технический углерод (сажа) – продукт некаталитического (как правило) пиролиза углеводородного сырья, содержащий преимущественно частицы глобулярной структуры с радиальной ориентацией микрокристаллов (кристаллитов) графита. Традиционные виды саж, получаемые парциальным окислением или термическим пиролизом углеводородов, являются основой для продуктов, в больших количествах используемых в производстве пластмасс, упаковки, резинотехнических изделий, однако данные способы имеют ограничения по возможностям варьирования структурных (определяющих электропроводность и окислительную стойкость) и поверхностных (активность, необходимое количество добавки, адсорбционные характеристики) свойств. Преодоление данных ограничений играет большую роль в развитии химических источников тока, каталитических систем, электротехнических устройств и других высокотехнологичных продуктов, в связи с чем в настоящее время активно развиваются плазмохимические методы получения технического углерода, позволяющие в широчайших пределах регулировать природу и концентрацию (парциальное давление) сырья, температурные градиенты, время пребывания в реакционной зоне, что приводит к получению дисперсных форм углерода разнообразной морфологии [1].

В настоящем докладе на основе опыта получения и исследования технического углерода, получаемого плазмохимическим пиролизом углеводородного сырья установлено, что сырье является принципиально важным параметром любого плазмохимического процесса, определяющим удельную поверхность и кристаллографические параметры получаемого углерода. Кроме того, за счет высокой пиковой температуры процесса (до 4–6 тыс. К) плазмохимические процессы отличаются высоким выходом ценных газов – водорода и ацетилена [2].

В работе исследовано 3 вида технического углерода: продукт, полученный высокотемпературным плазмохимическим пиролизом метана (температура процесса ок. 2,5 тыс.К), пиролизом ацетилена в пламени (при температурах около 1,8 и 2,2 тыс.К) и жидкофазным плазмохимическим пиролизом бензола в микроразрядах (до 4 тыс.К) по технологии, разработанной НГТУ [3].

Общей особенностью всех исследованных видов дисперсного углерода является фактическое отсутствие обнаружимых количеств зольных примесей, что можно связать с высокой эффективной температурой процесса, превышающей температуры испарения серы, железа, никеля и других металлов, как правило попадающих в данный вид продукта вследствие загрязненности сырья и уноса со стенок аппаратуры. Отсутствие примесей крайне важно с точки зрения применения данных материалов в химических источниках тока. Кроме того, плазмохимические сажи содержат заметные (до 20 масс.% при 1000 °С) количества летучих веществ, образующихся при неполной конденсации ароматических

радикалов, образующихся в процессе пиролиза. Все исследованные продукты имели околонейтральную реакцию среды в суспензии (рН 5-7), что также обусловлено высокой температурой получения и термолабильностью кислород-содержащих групп.

Вместе с тем, удельная поверхность полученных продуктов оказалась существенно зависящей от природы пиролизуемого сырья. Так, при пиролизе метана получены образцы с удельной поверхностью (адсорбция-десорбция азота при 77 К, метод Брунауэра-Эммета-Теллера) чуть менее 30 м<sup>2</sup>/г, в то время как пиролиз бензола позволяет получать углеродные материалы с удельной поверхностью около 350 м<sup>2</sup>/г (рис. 1). При этом температура плазменного потока оказывает значительное влияние на удельную поверхность образующихся продуктов – повышение эквивалентной температуры на 400 °С (22 %) приводит практически к двукратному росту удельной поверхности, причем средний диаметр пор слабо зависит от общей величины удельной поверхности и природы сырья и варьируется в пределах 104-139 Å.

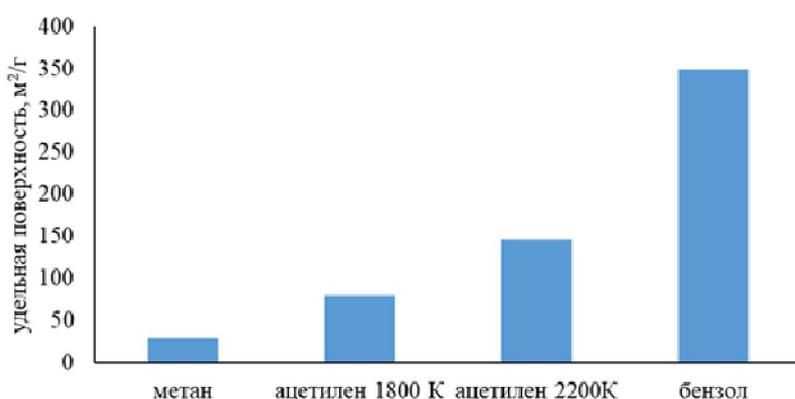


Рис. 1. Зависимость удельной поверхности технического углерода, полученного плазмолизом сырья различной природы

Дополнительно стоит отметить, что последующая термическая обработка является эффективным способом регулирования (снижения) общей удельной поверхности, в первую очередь, за счет схлопывания микро- и ультрамикропор. Например, термообработка сажи, полученной плазмолизом бензола в инертной среде при конечной температуре 2800 °С приводит к снижению удельной поверхности в 8,1 раза (до 43,15 м<sup>2</sup>/г).

Таким образом, выбор исходного сырья для проведения плазмохимического пиролиза, температуры плазмы и последующей термической обработки позволяют в широчайших пределах регулировать величину удельной поверхности получаемых дисперсных углеродных материалов, что позволяет применять типовые технологические процессы для получения дисперсных углеродных материалов с широким спектром свойств.

### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Khodabakhshi S., Fulvio P. F., Andreoli E. Carbon black reborn: Structure and chemistry for renewable energy harnessing. *Carbon*, 2020, vol. 162, pp. 604-649.
2. Cho W., Lee S.H., Ju W.S., Baek Y., Lee J.K. Conversion of natural gas to hydrogen and carbon black by plasma and application of plasma carbon black. *Catalysis Today*, 2004, vol. 98, № 4, pp. 633-638.
3. Bodrikov I.V., Ivanova A.G., Vasiliev A.L., Titov E.Y., Titov D.Y., Serov A.I. Influence of low-voltage discharge energy on the morphology of carbon nanostructures in induced benzene transformation. *RSC Advances*, 2021, vol. 11, pp. 39428–39437.

# Двумерные пленки на основе композита графен/Li<sub>4</sub>Ti<sub>5</sub>O<sub>12</sub> как перспективный материал для химических источников тока

Шунаев В.В.<sup>1</sup>, Петрунин А.А.<sup>1</sup>, Ушаков А.В.<sup>1</sup>, Глухова О.Е.<sup>1</sup>

e-mail: shunaevvv@sgu.ru

<sup>1</sup>ФГБОУ ВО «Саратовский национальный исследовательский государственный университет имени Н.Г. Чернышевского», Саратов, Россия

Химические источники тока (ХИТ) являются неотъемлемыми компонентами современных портативных электронных устройств, топливных элементах и перезаряжаемых источниках энергии. ХИТ на основе графена и титаната лития Li<sub>4</sub>Ti<sub>5</sub>O<sub>12</sub> (LTO) демонстрируют высокую производительность, циклическую стабильность и удельную емкость [1-2]. Полная емкость подобных низкоразмерных структур есть сумма емкостей двойного электрического слоя и квантовой емкости [3], отвечающей за накопление дополнительного заряда со сдвигом уровня Ферми и оказывающей важное влияние на емкостные свойства материалов.

В рамках метода ab initio были построены атомные супер ячейки графен/LTO с различными массовыми концентрациями (рис. 1а). Значения энергии образования, уровня Ферми с соответствующими значениями плотности электронных состояний, а также квантовой емкости при 0В представлены в таблице 1. Видно, что с ростом концентрации графена увеличивается значение плотности электронных состояний на уровне Ферми, что свидетельствует о повышении проводящих свойств материала. Вместе с тем увеличение массовой доли графена приводит к снижению квантовой емкости (рис. 1б). С помощью метода упругой ленты установлено, что добавление графена к ячейке LTO уменьшает энергетический барьер миграции атомов лития, что объясняет увеличение производительности ХИТ на основе графена/LTO, наблюдаемой в эксперименте.

Таблица 1. Электронно-энергетические характеристики композита графен/LTO с различными массовыми долями

Массовое соотношение m(LTO):m(графен)	Энергия образования, эВ	Уровень Ферми, эВ	Плотность электронных состояний, эВ	Квантовая емкость при 0В, Ф/г
4:1	-1,53	-6,33	8,60	413,88
2:1	-1,66	-6,23	9,60	408,27
1:1	-1,69	-6,22	10,44	319,32
1:2	-1,71	-6,14	12,27	263,47
1:4	-1,65	-5,75	15,05	205,50

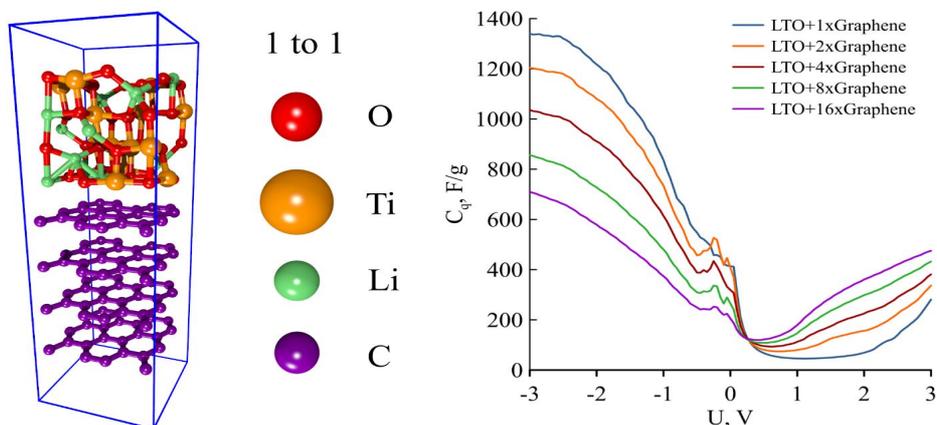


Рис. 1. Композит графен/LTO: а) суперячейка; б) графики квантовой емкости

**Финансирование:** Работа финансировалась Российским научным фондом (проект № 21-73-10091).

### **СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ**

1. Yan, H., Yao, W., Fan, R., Zhang, Y., Luo, J., Xu, J. Mesoporous Hierarchical Structure of  $\text{Li}_4\text{Ti}_5\text{O}_{12}$ /Graphene with High Electrochemical Performance in Lithium-Ion Batteries. *ACS Sustainable Chemistry & Engineering*, 2018, vol. 6, pp. 11360-11366.
2. Chen, X.; Chen, J.; Zhou, X.; You, M.; Zhang, C.; Yue, W. Two-dimensional graphene-based  $\text{Li}_4\text{Ti}_5\text{O}_{12}$  with hierarchical pore structure and large pseudocapacitive effect as high-rate and long-cycle anode material for lithium-ion batteries. *Electrochimica Acta*, 2022, vol. 405, pp. 139814.
3. Luryi S. Quantum capacitance devices. *Applied Physics Letters*, 1988, vol. 52. № 6, pp. 501-503.

# Теоретические исследования адсорбционного взаимодействия поливинилового спирта и УНТ с целью создания полимерных композитных материалов с усовершенствованными свойствами

Элбакян Л.С.<sup>1</sup>, Запороцкова И.В.<sup>2</sup>, Чешева М.Ф.<sup>2</sup>

e-mail: lusniak-e@yandex.ru

<sup>1</sup>ГОУ ВПО Российско-Армянский (Славянский) университет, Ереван, Армения

<sup>2</sup>ФГАОУ ВО «Волгоградский государственный университет», Волгоград, Россия

Работа направлена на решение актуальной фундаментальной проблемы наноматериаловедения новых материалов – создание научных основ конкурентноспособных методов получения и контроля новых композиционных материалов на основе углеродосодержащих полимерных матриц со стабилизированными в них нанотрубками. Выполнены теоретические исследования структуры, свойств, механизмов адсорбционного взаимодействия композитных материалах для разработки и оптимизации технологий их получения с целью насыщения рынка конкурентоспособными материалами, обеспечивающими социально-экономическое развитие РФ и повышение уровня жизни населения за счет планового импортозамещения в области электроники, наноэлектроники и радиотехники, а также биомедицине.

Выполнены компьютерные моделирования взаимодействия молекул полимера поливинилового спирта с УНТ для оптимизации структуры наносистем. Для подтверждения возможности создания полимерных композиционных материалов на основе ПВС, армированного УНТ, проведены теоретические расчеты процесса адсорбционного взаимодействия углеродных нанотрубок с фрагментом ПВС, содержащим несколько структурных единиц поливинилового спирта ( $n = 16$ ). Установлены наиболее эффективные центры выбранного фрагмента: во всех случаях им оказался атом кислорода рассматриваемого мономера. На основании теоретических расчетов, выполненных с использованием метода DFT, доказана адсорбционная активность полимера ПВС в отношении ОУНТ двух типов (6, 6) и (9,0). Полученные результаты доказывают, что основным механизмом, позволяющим получать стабильные композиционные полимерные комплексы «ПВС+УНТ», является адсорбционное взаимодействие структурных составляющих полимера ПВС с однослойными углеродными нанотрубками.

Таблица 1. Результаты квантово-химического расчета

ПОЛИМЕР	УНТ	Результаты квантово-химических расчетов	
	тип	$R_{ад}, \text{Å}$	$E_{ад}, \text{эВ}$
ПВС	(9,0)	4,1	0,06
	(6,6)	4,1	0,07

**Финансирование:** Гос. задание Министерства науки и высшего образования РФ (FZUU-2023-001).

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Elbakyan L., Zaporotskova I., Hayrapetyan D. Nanocomposite Material Based on Polyvinyl Alcohol Modified with Carbon Nanotubes: Mechanism of Formation and Electronic Energy Structure. *J. Compos. Sci.* 2024, V. 8, pp. 54.

## Борозамещенные малые фуллерены на основе фуллерена C<sub>24</sub>: стабильность и свойства

Эль Занин А.Р.<sup>1</sup>, Борознин С.В.<sup>1</sup>

e-mail: nmtb-201\_341523@volsu.ru

<sup>1</sup>ФГАОУ ВО «Волгоградский государственный университет», Волгоград, Россия

Возможность замещения атомов углерода атомами других элементов в углеродных наноструктурах позволяет управлять их механическими, электронно-проводящими, оптическими, химическими свойствами, что делает подобные материалы перспективными для широкого спектра практических приложений. Большое внимание к себе привлекают допированные бором углеродные наноматериалы: нанотрубки [1], графен [2] и др. Фуллерены в этом смысле также не являются исключением [3]. Большая часть исследований в области фуллеренов посвящена фуллеренам C<sub>60</sub> и C<sub>70</sub>, хотя данный класс соединений включает крайне большое число представителей, как с большим, так и с меньшим числом атомов углерода. В настоящей работе предлагается рассмотреть стабильность, электронные и зарядовые свойства малого фуллерена C<sub>24</sub>, допированного атомами бора.

Концентрации атомов бора составляли 15 %, 25 %, 50 %, и были обозначены как BC<sub>5</sub>, BC<sub>3</sub>, BC соответственно. Для оценки стабильности производился расчет энергии связи E<sub>b</sub>, определяемой по формуле:

$$E_b = nE(B) + (24 - n)E(C) - E(B_nC_{24-n})$$

где n – число атомов бора в структуре; E(B) – энергия изолированного атома бора; E(C) – энергия изолированного атома углерода; E(B<sub>n</sub>C<sub>24-n</sub>) – энергия соответствующего борозамещенного фуллерена.

Ширина запрещенной зоны ΔE<sub>g</sub> рассчитывалась как разность между энергиями нижней вакантной молекулярной орбитали E<sub>LUMO</sub> и верхней заполненной молекулярной орбитали E<sub>HOMO</sub>:

$$\Delta E_g = E_{LUMO} - E_{HOMO}$$

В общей сложности было рассмотрено пять структур: BC<sub>5</sub> с четырьмя замещенными атомами углерода, BC<sub>3</sub> типов А и В с шестью замещенными атомами углерода, BC типов А и В с двенадцатью замещенными атомами углерода (рис. 1).

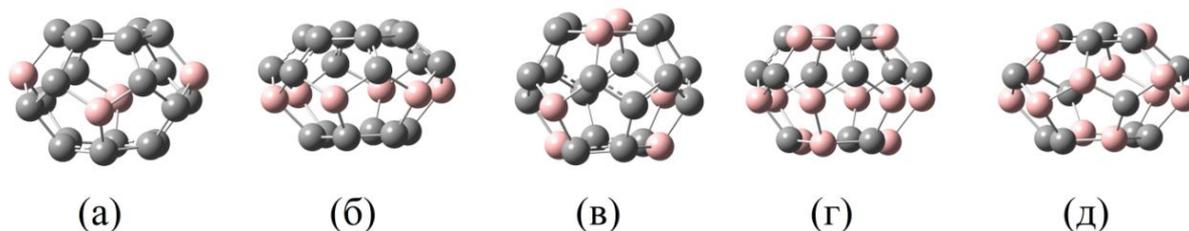


Рис. 1. Оптимизированные геометрии BC<sub>5</sub> (а), BC<sub>3</sub> типа А (б) и типа В (в), BC типа А (г) и типа В (д) борозамещенных структур фуллерена C<sub>24</sub>

Результаты расчета энергии связи представлены на рисунке 2. Видно, что с увеличением числа атомов бора в структуре ее стабильность снижается. Отметим, что из двух типов  $BC_3$  борозамещенных фуллеренов  $C_{24}$  более стабилен тип В, а из двух типов  $BC$  – тип А.

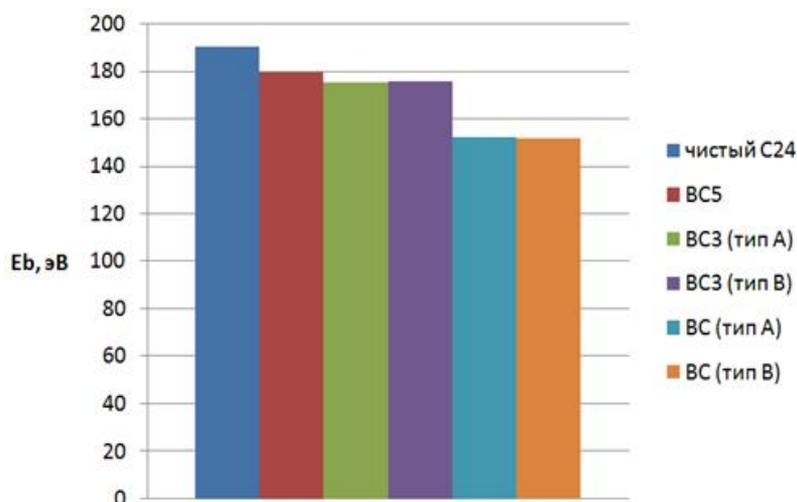


Рис. 2. Энергии связи  $E_b$  борозамещенных фуллеренов  $C_{24}$  с различной концентрацией атомов бора

Во всех рассмотренных борозамещенных фуллеренах наблюдается смещение электронной плотности с атомов бора на атомы углерода. Отметим, что подобная закономерность характерна для допированных бором углеродных наноматериалов в целом. Средние значения заряда на атомах бора и углерода для фуллеренов с различной концентрации атомов бора приведены в таблице 1.

Таблица 1. Средние значения зарядов на атомах бора и углерода в борозамещенных фуллеренах  $C_{24}$  с различной концентрацией и расположением атомов бора

Структура	$BC_5$	$BC_3$ (тип А)	$BC_3$ (тип В)	$BC$ (тип А)	$BC$ (тип В)
Средний заряд на В	0,308	0,247	0,329	0,243	0,257
Средний заряд на С	-0,061	-0,082	-0,110	-0,243	-0,257

В таблице 2 приведены рассчитанные значения ширины запрещенной зоны для рассмотренных структур. Видно, что сначала повышение концентрации атомов бора приводит к увеличению ширины запрещенной зоны, но при достижении концентрации в 50 % наблюдается ее снижение по сравнению с исходным фуллереном.

Таблица 2. Ширина запрещенной зоны  $\Delta E_g$  для борозамещенных фуллеренов  $C_{24}$  с различной концентрацией атомов бора

Структура	Чистый $C_{24}$	$BC_5$	$BC_3$ (тип А)	$BC_3$ (тип В)	$BC$ (тип А)	$BC$ (тип В)
$\Delta E_g$ , эВ	1,86	1,95	2,13	2,22	1,80	1,53

Таким образом, в работе были получены оптимизированные геометрии борозамещенных фуллеренов на основе  $C_{24}$ , оценена их стабильность, определены зарядовые и электронные свойства. Полученные результаты могут быть полезны для приложений в сферах электроники и оптоэлектроники, а также для разработки сенсоров различных веществ.

**Финансирование:** Работа выполнена в рамках государственного задания Министерства науки и высшего образования и науки РФ (тема “FZUU-2023-0001”).

### ***СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ***

1. Boroznin S.V. Carbon nanostructures containing boron impurity atoms: synthesis, physicochemical properties and potential applications. *Modern Electronic Materials*, 2022, vol. 8, № 1, pp. 23-42.
2. Thirumal V., Pandurangan A., Jayavel R., Ilangoan R.J.S.M. Synthesis and characterization of boron doped graphene nanosheets for supercapacitor applications. *Synthetic Metals*, 2016, vol. 220, pp. 524-532.
3. Sood P., Kim K.C., Jang S.S. Electrochemical Properties of Boron-Doped Fullerene Derivatives for Lithium-Ion Battery Applications. *ChemPhysChem*, 2018, vol. 19, №. 6, pp. 753-758.

## СОДЕРЖАНИЕ

<b>Организационный комитет конференции</b> .....	3
<i>Андрухова О.В., Сафронов И.С., Ушаков А.И., Овчаров А.А., Дмитриев С.В.</i> <b>Ударная деформация пучка УНТ. Компьютерный эксперимент</b> .....	4
<i>Астравух Я.В., Павлец А.С., Алексеенко А.А.</i> <b>Комбинированный платино-углеродный электрокатализатор для водородо-воздушных топливных элементов</b> .....	6
<i>Ермакова Т.А., Васильев В.А., Какорина О.А., Запороцкова И.В., Боковиков Д.О.</i> <b>Изучение сорбционного взаимодействия углеродных нанотрубок с продуктами выстрела пороха</b> .....	8
<i>Гончарова Н.Н., Будник Д.А., Будушин Д.А., Тарасов К.А., Самойлов В.М.</i> <b>Особенности процесса получения мезофазных пеков из нефтяного и каменноугольного сырья</b> .....	10
<i>Вережкина К.Ю., Борознина Н.П.</i> <b>Неупорядоченные углеродные нанотрубки и полимеры</b> .....	12
<i>Григорьев А.Д., Борознина Н.П., Борознин С.В., Запороцкова И.В.</i> <b>Азот-углеродные нанотрубки: обзор последних достижений в синтезе</b> .....	14
<i>Двужилова Ю.В., Двужилов И.С.</i> <b>Взаимодействие фотонного кристалла на основе примесных углеродных нанотрубок с мощным оптическим излучением</b> .....	19
<i>Демин В.А., Квашин Д.Г., Чернозатонский Л.А.</i> <b>DFT моделирование структуры и свойств муаровых H/F диаманов</b> .....	20
<i>Дьячков П.Н.</i> <b>Спиновая селективность проводимости хиральных нанотрубок</b> .....	21
<i>Ерофеев Д.Р., Борознина Н.П., Запороцкова И.В., Запороцков П.А.</i> <b>Исследование взаимодействия углеродных наноструктур с атомом серебра</b> .....	24
<i>Запороцкова И.В., Чешева М.Ф., Звонарева Д.А.</i> <b>Применение углеродных нанотрубок в качестве компонента ультратонкого лекарственного покрытия для медицинских стентов</b> .....	26
<i>Постельга А.Э., Игонин С.В.</i> <b>Особенности отражения СВЧ-излучения от композита «эпоксидная смола – магнитная жидкость – углеродные нанотрубки»</b> .....	30

<i>Конобеева Н.Н.</i> <b>Особенности взаимодействия электромагнитных импульсов с тонкой пленкой полимерного композита</b> .....	33
<i>Мальцева Н.А., Лыга Р.И., Михальчук В.М.</i> <b>Углеродные нанотрубки и терморасширенный графит в составе эпоксидно-аминных композитных покрытий</b> .....	35
<i>Мартышов М.Н., Кучумов И.Д., Швецов Б.С., Форш П.А.</i> <b>Многослойные наноструктуры на основе оксида гафния для создания стабильных мемристивных систем</b> .....	37
<i>Петрунин А.С.</i> <b>Разработка ориентированных углеродных наноструктур для электродных материалов и электрохимических систем накопления энергии</b> .....	39
<i>Радченко Д.П., Какорина О.А.</i> <b>Характеристики полимерных углеродосодержащих матриц со стабилизированными в ней ферромагнитными наночастицами для выделенных помещений</b> .....	40
<i>Романова К.А., Галяметдинов Ю.Г.</i> <b>Квантово-химическое моделирование взаимодействий в наноматериалах на основе жидкокристаллических полимеров и полупроводниковых квантовых точек</b> .....	42
<i>Рыбачок Н.С., Ермакова Т.А., Васильев В.А., Какорина О.А.</i> <b>Взаимодействие дисперсной среды на основе дисульфида молибдена с латентными следами рук</b> .....	44
<i>Стебенькова Н.А., Стебеньков А.М.</i> <b>Разработка метода подбора ИК защитных меток</b> .....	46
<i>Ушаков А.И., Сафронов И.С.</i> <b>Лазерное залечивание нанопор в поверхностном слое нанокристаллического металлического сплава</b> .....	49
<i>Тимникова В.А., Запороцкова И.В.</i> <b>Исследование возможности создания композитов на основе биополимера, армированного углеродными нанотрубками, для использования их в протезировании</b> .....	51
<i>Форш П.А., Стремоухов С.Ю., Хабарова К.Ю., Колачевский Н.Н.</i> <b>Связанные квантовые мемристоры для нейроморфных систем</b> .....	58

<i>Хозром И.М., Ошоров А.Д.</i> <b>Влияние углеродных нанотрубок на механические свойства композита на основе нанокристаллического сплава 5БДСР</b> .....	60
<i>Хробак А.В., Дьячкова Т.П., Язубов В.С., Титов Г.А.</i> <b>Исследование физико-механических характеристик эпоксидных композитов, модифицированных силанизированными углеродными наноструктурами</b> ....	62
<i>Шахназарова А.Б., Волкова М.Р., Горина В.А., Данилов Е.А.</i> <b>Зависимость пористости технического углерода, полученного плазмохимической обработкой углеводородов, от природы сырья</b> .....	64
<i>Шунаев В.В., Петрунин А.А., Ушаков А.В., Глухова О.Е.</i> <b>Двумерные пленки на основе композита графен/Li<sub>4</sub>Ti<sub>5</sub>O<sub>12</sub> как перспективный материал для химических источников тока</b> .....	66
<i>Элбакян Л.С., Запороцкова И.В., Чешева М.Ф.</i> <b>Теоретические исследования адсорбционного взаимодействия поливинилового спирта и УНТ с целью создания полимерных композитных материалов с усовершенствованными свойствами</b> .....	68
<i>Эль Занин А.Р., Борознин С.В.</i> <b>Борозамещенные малые фуллерены на основе фуллерена C<sub>24</sub>: стабильность и свойства</b> .....	69

Выполнено с использованием программ Microsoft Office Word, Adobe Acrobat

Систем. требования:  
браузер Google Chrome (версия 109.0.5414.120) или аналогичный;  
скорость подключения к Интернету от 10 Мбит/с;  
дополнительно: Adobe Reader или Adobe Acrobat 8.0

Главный редактор *Н. В. Горева*  
Техническое редактирование *Е. С. Решетниковой*  
Подготовка аппарата издания *М. Ю. Меркуловой, Е. С. Решетниковой*  
Оформление заставки *Н. Н. Захаровой*

Электронное издание сетевого распространения. 9,2 Мб.  
Подписано к распространению 14.05 2024 г. Размещено на сайте 07.06 2024 г. «С» 2.

Волгоградский государственный университет  
400062 Волгоград, просп. Университетский, 100  
[www.volsu.ru](http://www.volsu.ru)

Изготовлено в издательстве Волгоградского государственного университета  
400062 Волгоград, ул. Богданова, 32  
E-mail: [izvolgu@volsu.ru](mailto:izvolgu@volsu.ru)