



## Пятая Международная конференция

УГЛЕРОД:  
фундаментальные проблемы науки,  
материаловедение, технология



18-20 октября 2006 года  
МГУ им. М.В. Ломоносова

# ПРОБЛЕМЫ АНАЛИЗА И ИНТЕРПРЕТАЦИИ РЕНТГЕНОВСКИХ СПЕКТРОВ СИСТЕМ НАНОРАЗМЕРНЫХ ЧАСТИЦ ГРАФИТА

Зиятдинов А.М.

Институт химии ДВО РАН, 690022, г. Владивосток, пр-т 100-летия, 159

E-mail: ziatdinov@ich.dvo.ru

Наноразмерные частицы графита (нанографиты) стали объектами интенсивных теоретических и экспериментальных исследований, благодаря своим необычным физическим свойствам [1]. Одним из основных методов исследования строения наноразмерных частиц графита (нанографитов) – структурных блоков активированных углеродных материалов, в том числе, активированных углеродных волокон (АУВ), является метод рентгеновской дифракции. Этот метод позволяет зафиксировать (002) рефлекс рентгеновской дифракции и полосу (10), в которую вносят вклады (100) и (101) рефлексы. По положению (002) рефлекса обычно определяют среднее межслоевое расстояние в нанографитах, а по его ширине оценивают среднюю “толщину” нанографитов. По ширине полосы (10) можно оценить нижний предел средних размеров нанографитов в плоскости углеродных слоев. У некоторых активированных углеродных материалов полосу (10) можно разложить на её компоненты: (100) и (101), что позволяет повысить точность оценки средних размеров нанографитов в плоскости слоев. Однако расчеты показывают, что значение коэффициента Шеррера, которой используется при определении исходя из ширины рентгеновских рефлексов средних размеров наночастиц, само существенно зависит от них. Поэтому анализ рентгеновских рефлексов наноразмерных частиц по вышеописанной процедуре с целью оценки их средних размеров в некоторых случаях может привести к значительным ошибкам. В работе рассмотрены преимущества и недостатки различных подходов к решению этой проблемы.

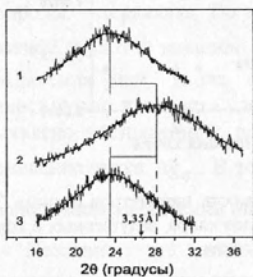


Рисунок. Изменения (002) рефлекса рентгеновской дифракции АУВ при адсорбции и десорбции молекул воды. (1 – исходный образец; 2 – образец, адсорбировавший воду; 3 – образец после десорбции воды. Стрелка указывает положение (002) пика для макроскопического графита).

место, в том числе, внедрение пространство нанографита.

При обработке активированных углеродных материалов различными веществами положение и ширина (002) рефлекса, а в некоторых случаях и (10) полосы, изменяются. В работе рассмотрены возможные причины этого, в том числе: 1) изменение коэффициента Шеррера; 2) изменение выпуклости наружных слоев графена; 3) изменение упаковки слоев графена, 4) наложение рефлексов от нанографитов и вещества, находящегося в порах волокна, 5) перенос заряда между нанографитом и адсорбированным на его поверхности веществом, 6) давление на нанографит со стороны вещества, находящегося в порах волокна и 7) внедрение молекул сорбированного волокном вещества в межслоевое пространство нанографита.

Анализ экспериментальных данных по изменению спектров рентгеновской дифракции АУВ после их обработки различными веществами (галогенами, спиртами, кислотами, водой,  $AlCl_3$ ,  $CCl_4$  и т.д.) показал, что в большинстве случаев имеет сорбированного волокном вещества в межслоевое

Работа была выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проект № 04-03-32135) и грантов ДВО РАН (проекты № 06-I-П8-010 и № 06-II-CO-04-013).

[1] Enoki T. *J. Phys. Chem. Solids*. 2004. 65. P. 103-108.

Подписано в печать 6.09.2006 г.

Тираж 250 экз.

Отпечатано полиграфическим предприятием ООО «ПРЕСТО-РК»

Тел./факс (495) 540-2703