



**УГЛЕРОД:
ФУНДАМЕНТАЛЬНЫЕ ПРОБЛЕМЫ НАУКИ,
МАТЕРИАЛОВЕДЕНИЕ, ТЕХНОЛОГИЯ.
КОНСТРУКЦИОННЫЕ
И ФУНКЦИОНАЛЬНЫЕ МАТЕРИАЛЫ
(В ТОМ ЧИСЛЕ НАНОМАТЕРИАЛЫ)
И ТЕХНОЛОГИИ ИХ ПРОИЗВОДСТВА**

**Материалы
Седьмой международной конференции**

Владимир, 17–19 ноября 2010 года

Владимир 2010

УДК 546.26: 661.6
ББК 30.37
У 25

Редакционная коллегия:

- В.Д. Бланк (ответственный редактор) – доктор физ.-мат. наук,
профессор
С.М. Аракелян – доктор физ.-мат. наук, профессор
В.Г. Прокошев – доктор физ.-мат. наук, профессор
В.Е. Ваганов – кандидат технических наук,
вед. специалист по научной работе
А.Ю. Лексин – кандидат физ.-мат. наук, доцент
Д.В. Абрамов – кандидат физ.-мат. наук, доцент

Организаторы и спонсоры конференции

- Министерство образования и науки Российской Федерации.
- Российский фонд фундаментальных исследований.
- Технологический институт сверхтвердых и новых углеродных материалов
- ЗАО «УНИХИМТЕК»
- Общероссийская общественная организация специалистов в области углерода и углеродных материалов «Углеродное общество».
- Московский государственный университет им. М.В.Ломоносова.
- Владимирский государственный университет.
- Институт новых углеродных материалов и технологий.
- ФГУП Государственный научно-исследовательский институт конструкционных материалов на основе графита «НИИГрафит».

Сборник материалов Седьмой международной конференции-семинара «Углерод: фундаментальные проблемы науки, материаловедение, технология. Конструкционные и функциональные материалы (в том числе наноматериалы) и технологии их производства», состоявшейся в городе Суздаль 17-19 ноября 2010 г., содержит работы, посвященные проблемам физики и химии углеродных материалов, а также их применения в различных инновационных направлениях науки и технологии. Данные работы выполнены как ведущими учеными, так и молодыми научными сотрудниками, аспирантами и студентами.

ISBN 978-5-9984-0098-8

© Владимирский государственный университет, 2010

ИЗМЕНЕНИЕ ЭЛЕКТРОННОГО СТРОЕНИЯ НАНОГРАФИТА ПУТЕМ ХИМИЧЕСКОЙ МОДИФИКАЦИИ ЕГО КРАЕВ

Зиятдинов А.М., Николенко Ю.М.

*Институт химии ДВО РАН, г. Владивосток, Россия,
e-mail: ziatdinov@ich.dvo.ru*

В нанографенах с зигзагообразными краями реализуется специфическое краевое π -электронное состояние [1]. Оно не присуще макроскопическому графиту и не порождено краевыми σ -связями, а обусловлено особенностями топологии сетки π -электронов зигзагообразных краевых рядов атомов. Энергетические зоны, соответствующие π -электронам зигзагообразных краев, имеют вблизи уровня Ферми частично плоское строение, вследствие этого появляется острый пик в спектре плотности электронных состояний. В расчетах электронного строения нанографенов с седлообразными краями подобное краевое состояние не возникает [1]. Что же касается нанографена со случайной структурой краев, то выявить теоретически характерные детали его электронного строения вблизи уровня Ферми пока не удастся ввиду сложности вычислений. В то же время, несколько независимых групп экспериментаторов уже доказали возможность образования стабильного краевого π -электронного состояния в графенах и нанографенах со случайной структурой краев [2, 3, 4, 5]. Из сказанного ясно, что нанографены и стопку из нескольких нанографенов (нанографит) можно рассматривать как новую мезоскопическую систему со специфическими свойствами, которые отличают их как от объемного графита, так и фуллеренов и нанотрубок. В настоящее время одно из наиболее перспективных направлений получения новых функциональных материалов на основе нано- и низкоразмерных частиц графита образуют работы по синтезу нанографенов и нанографитов с химически модифицированными краями. В данной работе представлены наиболее важные результаты в области синтеза и исследований нанографитов с химически модифицированными краями, полученные нами за последние несколько лет.

Нами были разработаны методы синтеза, синтезированы и изучены набором взаимодополняющих физических методов строение и свойства нанографенов и нанографитов, у которых доминирующая часть краевых атомов углерода образует ковалентные связи с выбранным галогеном. Изучено влияние облучения различными ионами на магнитные свойства трехмерной разупорядоченной сетки нанографитов. Показана возможность изменения электронного строения и магнитных свойств нанографита путем химической модификации его краев.

Совокупность полученных экспериментальных результатов и данные их анализа образуют важный этап на пути к синтезу нанографитов и нанографенов с неэквивалентными состояниями противоположных краев, которые, согласно расчетам [6], могут иметь магнитно-упорядоченные состояния. Обсуждаются перспективные направления синтеза и исследований таких соединений

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проект № 08-03-00211) и Президиума ДВО РАН (проект № 09-1-П118-07).

Литература

1. Nakada K. et al. Phys. Rev. B. 1996. Vol. 48, N 24. P. 17954–17961.
2. Зиятдинов А.М. Рос. хим. журн. 2004. Т. 47, № 5. С. 5–11.
3. Klusek Z. et al. Appl. Surf. Sci. 2005. Vol. 252, N 5. P. 1221–1227.
4. Kobayashi Y. et al. Phys. Rev. B. 2005. Vol. 71, N 193406. P. 1–4.
5. Niimi Y. et al. Appl. Surf. Sci. 2005. Vol. 241, N 1. P. 43–48.
6. Maruyama M. et al. J. Phys. Chem. Solids. 2004. Vol. 65, N 2. P. 119–12.

Научное издание

**Углерод:
фундаментальные проблемы науки, материаловедение, технология.
Конструкционные и функциональные материалы
(в том числе наноматериалы) и технологии их производства**

**Материалы Седьмой международной конференции
Владимир, 17–19 ноября 2010 г.**

Печатается в авторской редакции

Подписано в печать 25.10.10.

Формат 60×84/16. Усл. печ. л. 28,59. Тираж 300 экз.

Заказ *265-2010-1*

Издательство

Владимирского государственного университета.

600000, Владимир, ул. Горького, 87.

Тел.: (4922) 53-50-98

Факс: (4922) 53-50-98

E-mail: lascr@vlsu.ru