

**КОНФЕРЕНЦИЯ МОЛОДЫХ УЧЕНЫХ УРАЛЬСКОГО РЕГИОНА ПО ТЕМЕ:
«УЧАСТИЕ МОЛОДЫХ УЧЕНЫХ В ФУНДАМЕНТАЛЬНЫХ, ПОИСКОВЫХ
И ПРИКЛАДНЫХ ИССЛЕДОВАНИЯХ ПО СОЗДАНИЮ НОВЫХ УГЛЕРОДНЫХ
И НАНОУГЛЕРОДНЫХ МАТЕРИАЛОВ»**

Конференция молодых ученых Уральского региона на тему: «Участие молодых ученых в фундаментальных, поисковых и прикладных исследованиях по созданию новых углеродных и наноуглеродных материалов» была организована Общероссийской общественной организацией специалистов в области углерода и углеродных материалов «Углеродное общество» (УГО), Научным центром порошкового материаловедения Пермского государственного технологического университета, Федеральным государственным бюджетным научным учреждением «Технологический институт сверхтвердых и новых углеродных материалов» (ФГБНУ ТИСНУМ) и ОАО «НИИГрафит» и проведена в соответствии с программой конференции в г. Пермь 6-7 октября 2011 г.

В работе конференции приняли участие 34 представителя Уральского, Сибирского и Московского регионов России.

На конференции 23 доклада сделаны молодыми учеными, 3 пленарных доклада – ведущими специалистами «Углеродного общества», а также были выступления, посвященные проблемам производства на заводе «СИЛУР».

Проведенная конференция показала высокую заинтересованность молодых ученых в обмене мнениями с коллегами и с ведущими специалистами.

По ходу проведения конференции внимательно рассматривались вопросы, замечания и предложения выступавших. В Решении Конференции были отмечены доклады молодых ученых «Новые направления в технологии изготовления герметичных изделий из КМ» (Бутузов С.Е.), «Поиск подходов к синтезу волокнистого депозита на основе углеродных нанотрубок методом газофазного осаждения» (Хасков М.А.), «Технологические характеристики углеродных порошков на основе углеродных нанотрубок и связующих различной природы» (Данилов Е.А.), «Наноструктурирование поверхности углеродных волокон для создания композиционных материалов с улучшенными сдвиговыми характеристиками» (Толбин А.Ю.).

В ходе работы конференции были отобраны статьи для публикации, которые предлагаются вашему вниманию на страницах этого выпуска журнала.

*Президент Общероссийской общественной
организацией специалистов в области углерода
и углеродных материалов «Углеродное общество»
В.Д. Бланк*

УДК 538.975

А.Г. Квашнин, П.Б. Сорокин

ИССЛЕДОВАНИЕ ОСОБЕННОСТЕЙ ФАЗОВЫХ ПЕРЕХОДОВ В СВЕРХТОНКИХ АЛМАЗАХ

(Технологический институт сверхтвёрдых и новых углеродных материалов)
e-mail: agkvashnin@gmail.com, pbsorokin@gmail.com

Исследована атомная структура и физические свойства алмазных пленок нанометровой толщины с поверхностью (111). С использованием метода теории функционала электронной плотности исследована стабильность пленок с чистой поверхностью и с поверхностью, пассивированной атомами водорода. Изучен процесс фазового превращения «многослойный графен – алмазная пленка». Рассчитано давление фазового перехода в зависимости от толщины структуры. Полученные результаты находятся в хорошем соответствии с экспериментальными данными.

Ключевые слова: DFT, графен, диаман, фазовые переходы

Двумерный материал графен привлек к себе внимание задолго до его экспериментального получения: первое теоретическое изучение графена было датировано 1946 годом, когда впервые была изучена его зонная структура [1]. Успешные эксперименты по получению графена, проведенные в 2004 г. [2], дали начало комплексному исследованию этого материала. Баллистическая проводимость, псевдохиральная дираковская природа носителей заряда, аномальный эффект Холла [3] позволили графену стать одним из самых перспективных материалов для применения в нанотехнологии.

Частичное гидрирование графена увеличило количество возможных применений его в нанoeлектронике. Регулярная адсорбция водорода изменяет электронную структуру графена, открывая запрещенную зону, зависящую от расстояния между гидрированными участками на графене [4-8]. Полное гидрирование графена меняет природу электронных состояний из-за изменения sp^2 гибридизации орбиталей атома С на sp^3 и открывает диэлектрическую запрещенную зону в полученном материале, который был назван графаном [9,10]. Вскоре теоретическое предсказание было подтверждено в эксперименте [11].

Графан можно назвать первым представителем семейства сверхтонких алмазных пленок (диаманов) с sp^3 -связями, состоящих из конечного количества $\langle 111 \rangle$ - ориентированных углеродных

слоев, проявляющих уникальные физические свойства. Изначально структура диамана была предложена Л.А. Чернозатонским и др. в 2009 г. [12].

Последовательное изучение графена, графана и предложенных диаманов может быть рассмотрено как подход «снизу-вверх», в котором конечный материал (диаман) собирается из более мелких элементов (графенов). Такой подход противоположен стандартному подходу «сверху-вниз» применяемому в настоящее время. Основной целью данной работы является изучение энергетической стабильности и фазовых переходов из многослойного графена в диаман.

Атомная структура диаманов, представляющая собой ковалентно-связанную стопку графеновых слоев с различным их количеством, изображена на рис. 1. Изменение типа упаковки приводит к возможности получения различных поли типов диамановых структур. Таким образом, диаманы могут быть классифицированы как $D(ijk...l)$, где индексы i, j, k, l обозначают тип смещения атомных плоскостей. Каждый из этих индексов может быть равен А, В или С. Например, двух- и трехслойные диаманы с алмазными типами упаковки (АВСАВС...) обозначаются как D(АВ) и D(АВС), соответственно. Двух- и трехслойные диаманы с лонсдейлитовой упаковкой типа (ААА...) обозначаются как D(АА) и D(ААА) соответственно.

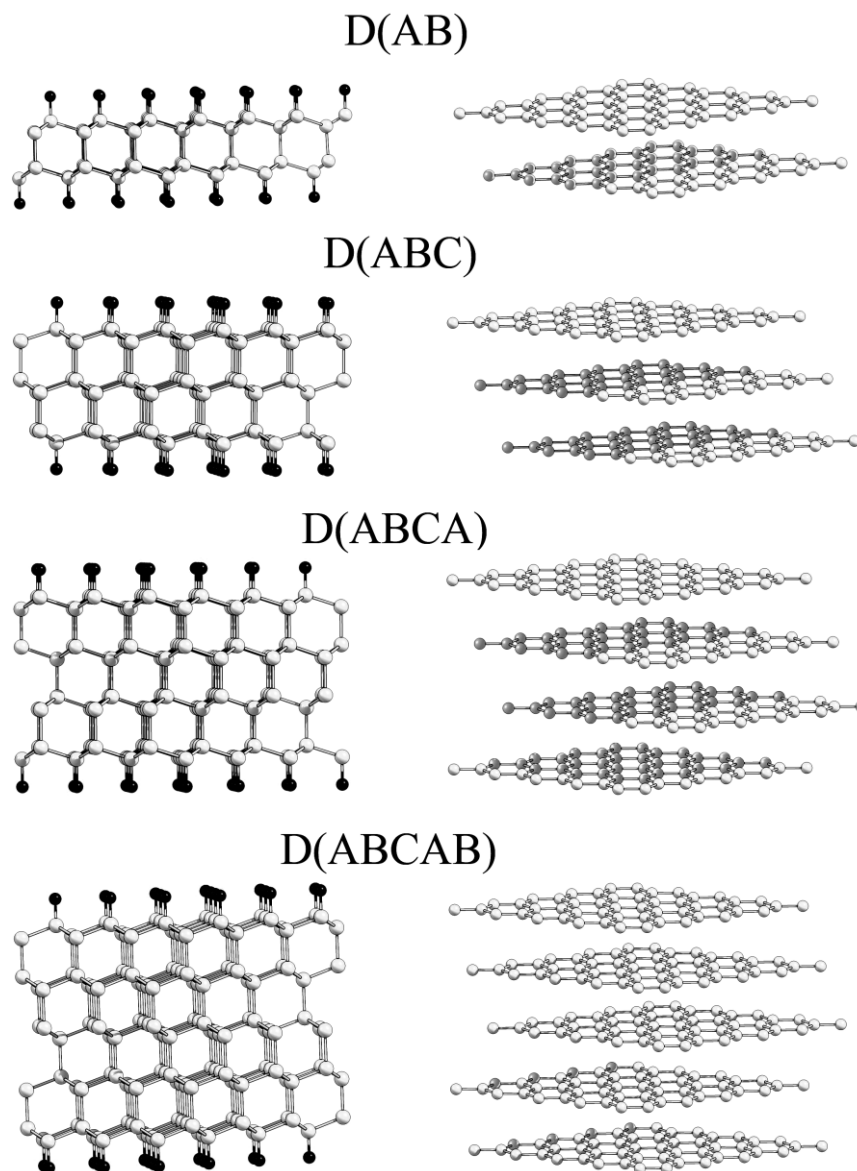


Рис. 1. Атомная структура диамантов с гидрированной поверхностью с различным количеством слоев, и соответствующие им атомные структуры многослойных графенов. D(AB), D(ABC), D(ABCA), D(ABCAB) – двух, трех, четырех и пятислойные диаманты с упаковкой типа ABC

Fig. 1. Atomic structure of diamondanes with hydrogenated surface with different number of layers and corresponding to them atomic structures of multilayer graphenes. D(AB), D(ABC), D(ABCA), D(ABCAB) – two, three, four and five layer diamondanes with ABC packing

С помощью первопринципных методов теории функционала электронной плотности была исследована стабильность диамантов с гидрированной и чистой поверхностями. Расчеты были проведены с помощью программного пакета Quantum ESPRESSO¹³ в приближении локальной электронной плотности с использованием ультрамягкого псевдопотенциала Вандербиля [14]. Были исследованы диаманты как с чистой поверхностью, так и с поверхностью, пассивированной атомами водорода. Найдено, что в стабильности сверхтонких алмазных пленок определяющую роль играют поверхностные эффекты. Так, отсутствие пассивирующего слоя в диамантах D(AB),

D(ABC), D(ABCA) приводит к расслоению структур и трансформации их в многослойный графен. Данный результат связан с эффектом графитизации, обусловленной, в свою очередь, энергетической выгодностью графита по сравнению с алмазом. Так, было получено, что в углеродных алмазных наноклстерах поверхность (111) трансформируется в графеноподобную структуру [15]. С другой стороны, многослойный графен с адсорбированными атомами водорода на поверхности может безбарьерно переходить в сверхтонкую алмазную пленку, что объясняется повышением химической активности атомов углерода поверхности из-за изменения их гибридизации с sp^2 на sp^3 .