

# **ТЕЗИСЫ ДОКЛАДОВ**

## **МЕЖДУНАРОДНАЯ КОНФЕРЕНЦИЯ**

**«Физическая мезомеханика.  
Материалы с многоуровневой иерархически  
организованной структурой и интеллектуальные  
производственные технологии»,**

посвященная 90-летию со дня рождения  
основателя и первого директора ИФПМ СО РАН  
**академика Виктора Евгеньевича Панина**

**в рамках  
Международного междисциплинарного симпозиума  
«Иерархические материалы: разработка и приложения  
для новых технологий и надежных конструкций»**

**5–9 октября 2020 года  
Томск, Россия**

Томск  
Издательство ТГУ  
2020

DOI: 10.17223/9785946219242/303

**ФОРМИРОВАНИЕ И ВЛИЯНИЕ БЛИЖНЕГО ПОРЯДКА  
НА СВОЙСТВА И ХАРАКТЕРИСТИКИ ФТОРИРОВАННОГО ГРАФЕНА**

<sup>1</sup>Белослудцева А.А., <sup>1</sup>Бобенко Н.Г., <sup>2</sup>Мельникова Н.В.

<sup>1</sup>Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск

<sup>2</sup>Сибирский физико-технический институт им. акад. В.Д. Кузнецова Национального исследовательского Томского государственного университета, Томск

Фторирование графена важно для улучшения его физико-химических характеристик с целью последующего его применения в химических сенсорах, оптоэлектронике, а также гибкой и печатной электронике [1]. В настоящее время существует достаточное количество теоретических и экспериментальных исследований, посвященных полностью функционализированному фтором графену. Однако работ, посвященных частично фторированному графену, все еще недостаточно, хотя именно в таком графене проявляется аномальное поведение электронных свойств и различных характеристик [2-4], обусловленное изменением структуры. Поэтому изучение взаимосвязи структуры и свойств фторированного графена при небольших концентрациях фтора является актуальной задачей.

Экспериментальные исследования [2-4] показывают, что при функционализации графена фтором в малой концентрации (до 25%) могут образовываться следующие ионные, полуионные и ковалентные функциональные группы в слое и на поверхности графена: CF, CF<sub>2</sub>, CF<sub>3</sub>, C-CF, C-CF<sub>x</sub>, FC-CF<sub>2</sub>, а комбинация этих функциональных групп меняется в зависимости от концентрации фтора и способа модификации структуры.

В настоящей работе с использованием теории ближнего порядка Кривоглаза-Кацнельсона [5] было проведено теоретическое исследование зависимостей параметров ближнего порядка от концентрации для различных фторсодержащих функциональных групп в частично фторированном графене. Расчеты проводились для ионной и ковалентной C-F групп и ковалентной группы C-F<sub>2</sub> в двух возможных конфигурациях при концентрации фтора *c* менее 20%. Выбор групп обусловлен экспериментальными данными [2-4, 6] о порядке появления в структуре графена разного типа C-F связей с ростом концентрации фтора. Результаты расчетов приведены на рис.1.

Проведенные исследования показали, что группы C-F с ионной связью (линия №1 на рис.1), начинают формироваться при концентрации 2-3% и являются доминирующими при *c* < 5%, что совпадает с экспериментальными данными [3, 4, 6]. С последующим повышением концентрации фтора сначала появляются ковалентные C-F группы (линия №2 на рис.1), а при достижении *c* 7-8% начинают образовываться более сложные функциональные группы (линии №3-4 на рис.1), содержащие два атома фтора, что также согласуется с экспериментальными данными [3, 4, 6]. При этом значение параметра порядка для ковалентных функциональных групп с увеличением *c* меняет свой знак с отрицательного на положительный при определенной концентрации для каждой группы, что соответствует переходу структуры системы от «упорядочения» к «расслоению». Отметим, что экспериментально было обнаружено открытие щели в плотности электронных состояний [3], а также скачки и отрицательное значение дифференциальной проводимости [4] и другие необычные свойства фторированного графена именно в случае преобладания одного из типов или комбинации функциональных групп, значения параметров ближнего порядка которых может менять знак. Это говорит о важной роли определенного типа ближнего порядка в структуре графена при настройке его свойств.

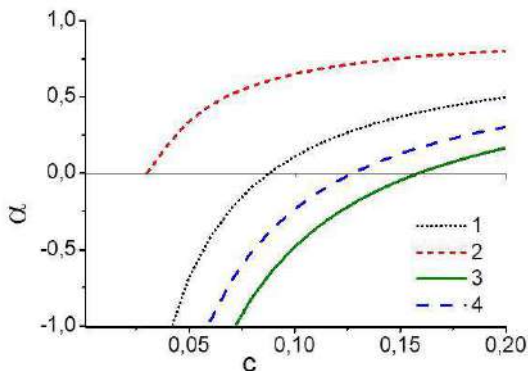


Рис.1. Рассчитанная концентрационная зависимость параметров ближнего порядка  $\alpha(c)$  для функциональных групп: C-F с ковалентной (линия №1) и ионной связью (линия №2) и C-F<sub>2</sub> для случаев расположения двух атомов фтора над и под атомом углерода (линия №3) и над центрами ближайших шестиугольников (линия №4).

Таким образом, проведенные в настоящей работе исследования взаимосвязи структуры и свойств слабо фторированного графена показали важность формирования определенного типа ближнего порядка и структурных перестроек типа “упорядочение-расслоение” в формировании особенностей поведения его электронных свойств и физических характеристик.

*Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ и администрации Томской области в рамках научного проекта № 18-42-703019 p\_мол\_a, а также в рамках государственного задания ИФПМ СО РАН, проект III.23.2.8.*

1. Antonova I. V., Kurkina I. I., Gutakovskii A. K., Kotin I. A., Ivanov A. I., Nebogatikova N. A., Soots R. A., Smagulova S. A. Fluorinated graphene suspension for flexible and printed electronics: flakes, films, and heterostructures // *Materials and design*. 2019. Vol. 164. P. 107526.
2. Cheng L., Jandhyala S., Mordí G., Lucero A.T., Huang J., Azcatl A., Addou R., Wallace R.M., Colombo L., Kim J. Partially Fluorinated Graphene: Structural and Electrical Characterization // *ACS Appl. Mater. Interfaces*. 2016. Vol. 8(7). P.5002-5008.
3. Ribas M. A., Singh A. K., Sorokin P. B., Yakobson B. I. Patterning Nanoroads and Quantum Dots on Fluorinated Graphene // *Nano Research*. 2011. Vol.4, P.143–152.
4. Antonova I. V., Kurkina I. I., Nebogatikova N. A., Komonov A. I., Smagulova S. A. Films fabricated from partially fluorinated graphene suspension: structural, electronic properties and negative differential resistance // *Nanotechnology*. 2017. Vol. 28 (7). P.) 074001.
5. Iveronova V. I., Katsnelson A. A., *Proc. Int. Symp. Ord.-Dis. Transf. All.* 306–331 (1974).
6. Liu Y., Jiang L., Wang H., Wang H., Jiao W., Chen G., Zhang P., Hui D., Jian X. A brief review for fluorinated carbon: synthesis, properties and applications // *Nanotechnology Reviews*. 2019. Vol. 8(1). P.573–586