

РЕНТГЕНСПЕКТРАЛЬНОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ОСОБЕННОСТЕЙ ЭЛЕКТРОННОЙ СТРУКТУРЫ ПУСТЫХ ГРАФИТНЫХ НАНОЧАСТИЦ

**Илькив Б.И., Фоя А.А., Петровская С.С., Сергиенко Р.А.⁽¹⁾, Илькив А.В.⁽²⁾,
Зауличный Я.В.⁽²⁾**

Институт проблем материаловедения НАН Украины,

ул. Крижановского, 3, Киев, 03068, Украина; e-mail: b_ilkiv@ukr.net

⁽¹⁾Физико-технологический институт металлов и сплавов НАН Украины,
бульвар Вернадского, 34, 03068, Украина; e-mail: rsruslan17@gmail.com

⁽²⁾Национальный технический университет Украины «КПИ»

ул. Политехническая, 35, Киев 03056, Украина; e-mail: zaulychnyy@ukr.net

Углеродные 3D структуры могут найти широкое применение в энергетических технологиях. Это обуславливает необходимость изучения электронной структуры данных материалов, которая определяет их свойства. Широко известно, что p -состояния в углеродных материалах вносят основной вклад в межатомное взаимодействие. Поэтому для изучения энергетического распределения Sp -электронов в пустых графитных наночастицах необходимо исследовать их SK_{α} -эмиссионные полосы. SK_{α} -спектры были записаны с помощью рентгеновского спектрометра-монохроматора РСМ-500 с разрешающей способностью 0,2 эВ.

Пустые графитные наночастицы были получены плазменным методом в гексане. Диаметр наночастиц варьировался от 30 нм до несколько сотен микрон (Рис. 1).

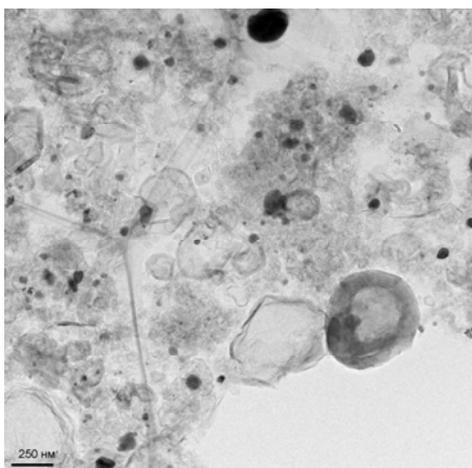


Рис. 1 Изображение пустых графитных наночастиц, полученное с помощью просвечивающей электронной спектроскопии

Рентгеноспектральное исследование пустых графитных наночастиц в сравнении с графитом и онионами (Рис. 2) показало, что в пустых графитных наночастицах образуются sp -гибридные связи между атомами углерода и

железа при перекрывании высокоэнергетических $3d+4s$ -состояний с sp^2 -гибридными орбиталями.

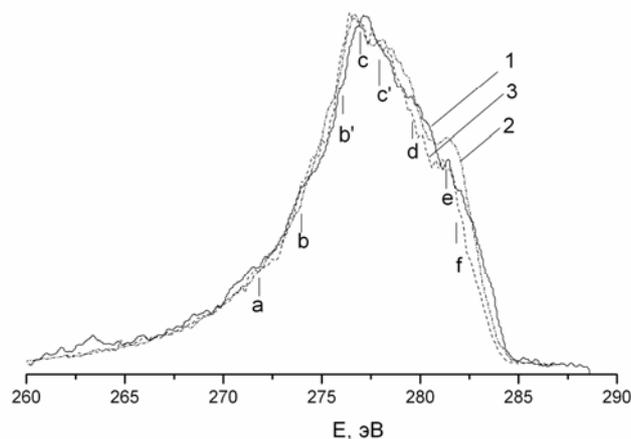


Рис. 2 SK_{α} -полосы пустых графитных наночастиц (1), графита (2) и онионов (3)

Это свидетельствует о том, что часть атомов железа может находиться в стенках пустых графитных наночастиц, оставаясь после отмытия в кислотах.

Подобно онионам в пустых графитных наночастицах выявлены разные степени π -перекрывания p_z -орбиталей над сферической поверхностью пустых графитных наночастиц. Разные степени перекрывания возникают вследствие того, что кривизна сферических атомных поверхностей при углублении в пустые графитные наночастицы возрастает, в результате чего уменьшается степень π -перекрывания p_z -орбиталей над поверхностью.

Выявлено возрастание вклада от перекрывания $pp\pi+pp\sigma$ -состояний в большем количестве стенок пустых графитных наночастиц благодаря большому диаметру частичек по сравнению с онионами.