

МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ  
СУМСЬКИЙ ДЕРЖАВНИЙ УНІВЕРСИТЕТ

ФІЗИКА, ЕЛЕКТРОНІКА,  
ЕЛЕКТРОТЕХНІКА

**ФЕЕ :: 2013**

**МАТЕРІАЛИ  
та програма**

НАУКОВО-ТЕХНІЧНОЇ КОНФЕРЕНЦІЇ

(Суми, 22-27 квітня 2013 року)

Суми  
Сумський державний університет  
2013

## Особливості електронної структури пустих графітних наночастинок

Ільків Б.І.<sup>1</sup>, мол. наук. співроб.; Фоя О.О.<sup>1</sup> наук. співроб.;  
Петровська С.С.<sup>1</sup>, наук. співроб.; Сергієнко Р.А.<sup>2</sup>, наук. співроб.;  
Зауличний Я.В.<sup>1,3</sup>, проф.

<sup>1</sup> Інститут проблем матеріалознавства ім. І.М. Францевича  
НАН України, м. Київ

<sup>2</sup> Фізико-технологічний інститут металів і сплавів НАН України, м. Київ

<sup>3</sup> Національний технічний університет України «КПІ», м. Київ

Методом ультрам'якої рентгенівської емісійної спектроскопії було досліджено електронну структуру пустих графітних наночастинок.

Встановлено, що в пустих графітних наночастинках утворюються *sp*-гібридні зв'язки між атомами вуглецю та залишкового заліза при перекриванні високоенергетичних  $3d+4s$ -станів з  $sp^n$ -гібридними орбіталями ( $2 < n < 3$ ). Це свідчить про те, що частина атомів заліза може знаходитись в стінках пустих графітних наночастинок, залишившись після відмивання в кислотах.

Виявлено різний ступінь  $\pi$ -перекриття  $p_z$ -орбіталей над сферичною поверхнею пустих графітних наночастинок. Різні ступені перекриття виникають внаслідок того, що кривизна сферичних атомних поверхонь при поглибленні в пусті графітні наночастинок зростає, в результаті чого зменшується ступінь  $\pi$ -перекриття  $p_z$ -орбіталей над поверхнею і збільшується у середині неї.

Встановлено, що  $SK_\alpha$  пустих графітних наночастинок ширша за смугу оніонів. Це є наслідком зростання вкладу від перекриття  $pp\pi+pp\sigma$ -станів в більшій кількості стінок пустих графітних наночастинок завдяки більшому діаметру частинок у порівнянні з оніонами.

Поверхні пустих графітних наночастинок у порівнянні з графеновими нанолістами значно менш гофровані, тому різниця в ступенях перекриття  $pp_z$ -станів та  $sp^n$ -гібридних орбіталей внаслідок гофрування зменшується, тоді як перекриття цих орбіталей зростає завдяки збільшенню кривизни шарів при поглибленні в пусті графітні наночастинок.