

Юров В.М.¹, Жангозин К.Н.¹, Жанабергенов Т.К.¹, Каргин Д.Б.²

¹«Восток», г. Астана, Караганда, Казахстан

²Евразийский национальный университет им. Л.Н.Гумилева,
г. Астана, Казахстан

ПОВЕРХНОСТНЫЕ ЯВЛЕНИЯ В ГРАФИТЕ И ПОЛУЧЕНИЕ ИЗ НЕГО ГРАФЕНА

Аннотация. В статье предложен обзор наших последних теоретических работ по графиту и графену. Предложена модель определения толщины поверхностного слоя графита, откуда можно вычислить прочность графита и графена, определить длину нанотрещин в поверхностном слое этих материалов. Предложена модель механизма расщепления графита и получения графена. Показано, что можно расщепить графит, используя для нагрева импульсный пикосекундный лазер. Предложена модель механизма расщепления графита водными растворами. В основу модели положена оригинальная инновационная методика применения для получения порошкового графена микрокластерной воды в сочетании с ультразвуком и электрическим полем. Предложена модель оценки барьера Пайерлса – Набарро, приводящего к торможению дислокаций в поверхностном слое графена. Показано, что барьер Пайерлса – Набарро в графене максимален для моновакансии.

Ключевые слова: графит, графен, поверхность, модель, дефект, механизм.

• • •

Түйіндеме. Мақалада графит пен графен туралы соңғы теориялық жұмысымызға шолу ұсынылады. Графиттің беткі қабатының қалыңдығын анықтауға арналған модель ұсынылған, оның негізінде графит пен графеннің беріктігін есептеуге және осы материалдардың беткі қабатындағы наножарықшалардың ұзындығын анықтауға болады. Графитті бөлу және графен алу механизмінің моделі ұсынылған. Қыздыру үшін импульстік пикосекундтық лазердің көмегімен графитті бөлуге болатыны көрсетілді. Графиттің сулы ерітінділермен бөліну механизмінің моделі берілген. Модель микрокластерлік суды ультрадыбыстық және графен ұнтағын алу үшін электр өрісімен үйлестіре пайдаланудың түпнұсқа инновациялық техникасына негізделген. Графеннің беткі қабатындағы дислокацияны тежеуге әкелетін Пейерлс-Набарро тосқауылын бағалау үшін модель ұсынылған. Графендегі Пейерлс-Набарро тосқауылының моновакансия үшін максималды болатыны көрсетілген.

Түйінді сөздер: графит, графен, бет, модель, ақау, механизм.

• • •

Abstract. The article offers an overview of our latest theoretical work on graphite and graphene. A model is proposed for determining the thickness of the surface layer of graphite, from which the strength of graphite and graphene can be calculated and the length of nanocracks in the surface layer of these materials can be determined. A model of the mechanism of graphite splitting and graphene production is proposed. It was shown that it is possible to split graphite using a pulsed picosecond laser for heating. A model of the mechanism of graphite splitting by aqueous solutions is proposed. The model is based on an original innovative technique for using microcluster water in combination with ultrasound and an electric field to obtain powder graphene. A model is proposed for assessing the Peierls–Nabarro barrier, which leads to inhibition of dislocations in the surface layer of graphene. It is shown that the Peierls–Nabarro barrier in graphene is maximum for a monovacancy.

Key words: graphite, graphene, surface, model, defect, mechanism.

Введение. Графен, созданный 20 лет тому назад [1], представляет уникальный материал, которому суждено стать веществом XXI в. [2, 3]. Области применения графена самые разнообразные (рисунок 1). Мировой рынок графена начал увеличиваться лишь пять лет тому назад, что было связано с высокой стоимостью графена (рисунок 2). В Казахстане лишь недавно графеносодержащие наноматериалы были получены методом электродугового разряда на основе кокса из угля месторождения «Шубарколь» при температуре 1173 К в

среде азота. Несколько слоистых хлопьев графена синтезированы с использованием дугового разряда при постоянном напряжении 75 В и силе тока 150, 300 А в кварцевом реакторе [4]. Нами также в этом году предложены новые способы получения графена [5–8]. Однако, промышленного применения графена в Казахстане пока-что нет.



Рисунок 1 – Области применения графена [2, 3].

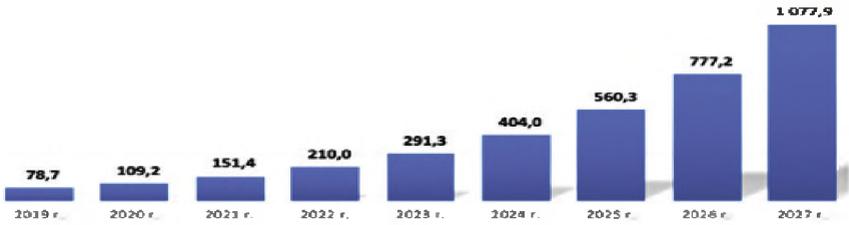


Рисунок 2 – Динамика мирового рынка графена в млн. долл. США
(Источник: Grand View Research)

Цель работы – сделать краткий обзор наших последних теоретических работ по графиту и графену; сделать соответствующие выводы и предложить научным группам Казахстана включиться в работу с графеном – самым удивительным материалом, применяемым в различных областях человеческой деятельности.

Толщина поверхностного слоя, дефекты и прочность графита [9]. Графит является термодинамически стабильной аллотропной модификацией углерода - элемента 4-ой группы главной подгруппы 2-го периода периодической системы, порядковый номер 6, атомная масса природной смеси изотопов 12,0107 г/моль. Теоретическая плотность, равная 2,26 г/см³, достигается лишь в природном графите. Плотность же искусственного графита находится в пределах 1,65-1,75 г/см³. Столь низкая плотность искусственного графита объясняется его пористостью [10]. Графит не плавится, но сублимируется при температуре около 3650 °С.

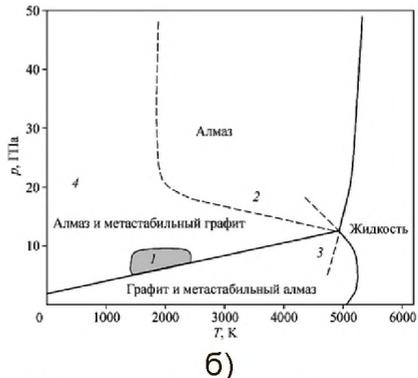
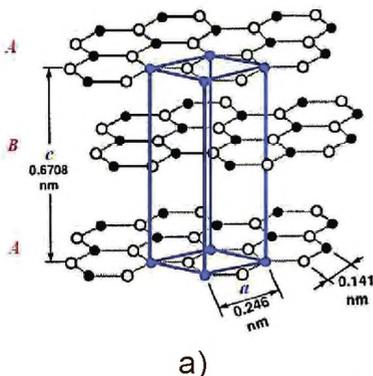


Рисунок 3 – Структура α -графита (а) [10] и фазовая диаграмма углерода (б) [11].

Кристаллическая структура графита имеет гексагональную симметрию и состоит из плоских слоев атомов углерода, расположенных параллельно друг другу (рисунок 3а). Фазовая диаграмма углерода по Банди [11] показана на рисунке 3б.

У α -графита половина атомов каждого слоя располагается над и под центрами шестиугольника (укладка ...АВАВАВА...) (рисунок 3а). Каждый атом углерода ковалентно связан с тремя другими окружающими его атомами углерода. Так как связи, действующие в базисных плоскостях (энергия связи равна 420...460 кДж/моль), и связи между этими базисными плоскостями (энергия связи равна 42 кДж/моль) сильно различаются, в монокристаллическом графите существует сильная анизотропия свойств, а это определяет особенности свойств и структуры поликристаллических графитов.

Толщина поверхностного слоя $R(l)$ и длина нанотрещин L_{nm} дается эмпирической формулой:

$$R(l) = L_{nm} = 0,17 \cdot 10^{-9} \cdot \alpha \cdot \nu [M]. \quad (1)$$

В уравнении (1) нужно знать один параметр – молярный объем элемента, который равен $\nu = M/\rho$ (M – молярная масса, ρ – ее плотность), $\alpha = 1 \text{ м}^{-2}$ – постоянная, чтобы соблюдалась размерность ($R(l) = [M]$).

Схема поверхностного слоя показана на рисунке 4а, а на рисунке 4б показана таблица Д.И. Менделеева с периодической зависимостью объема ν от Z .

По формуле (1) рассчитаем $R(l) = L_{nm}$ (таблица 1) для графита параллельно плоскости $x = a = b$ и перпендикулярно этой плоскости $x = c$.

Таблица 1. Параметры $R(l) = L_{nm}$ графита

Графит	Структура	M, г/моль	ρ , г/см ³	$R(l)_a = L_{nma}$, нм	$R(l)_c = L_{nmc}$, нм
C	C6/mmc-D _{6h} ⁴	12,0107	2,26	0.90 (3)	2.46 (3)
			1,75	1.17 (4)	3.19 (4)
			1,65	1.24 (5)	3.39 (5)

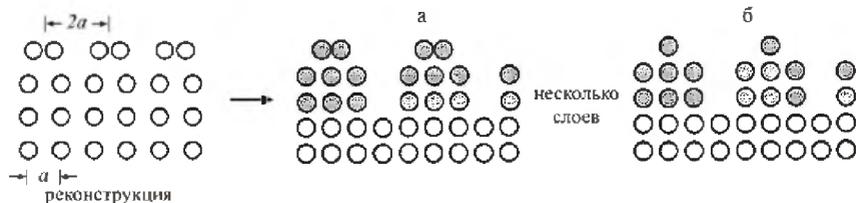


Рисунок 5 – Преобразование поверхности графита

Размерные эффекты в слое $R(l)$ определяются всем коллективом атомов в системе (коллективные процессы). Такие «квазиклассические» размерные эффекты наблюдаются только в наночастицах и наноструктурах. Значит, слой $R(l)$ представляет нанослой (рисунок 4а).

Поверхностная энергия объемного металла γ_2 с точностью до 3% равна:

$$\gamma_2 = 0,7 \cdot 10^{-3} \cdot T_m [\text{Дж/м}^2], \quad (2)$$

где T_m - температура плавления элемента (К).

В слое $R(l)$ нужно учесть размерный эффект и поверхностная энергия становится равной γ_1 :

$$\gamma_1 = \gamma_2 (1 - R(l) / R(l) + h) \approx 0,3\gamma_2. \quad (3)$$

Уравнение (3) показывает, что поверхностная энергия слоя $R(l)$ в три раза меньше поверхностной энергии основного кристалла. Чтобы разделить слой $R(l)$ от остального кристалла, нужно затратить энергию, которая называется энергией адгезии:

$$W_a = \gamma_1 + \gamma_2 - \gamma_{12} \approx \gamma_1 + \gamma_2 = 1,3\gamma_2, \quad (4)$$

где γ_{12} – поверхностная энергия на границе раздела фаз, которая пренебрежимо мала, в силу фазового перехода II рода.

Внутренние напряжения σ_{is} между фазами γ_1 и γ_2 можно просчитать по формуле:

$$\sigma_{is} = \sqrt{W_a \cdot E / R(l)}, \quad (5)$$

где E – модуль упругости Юнга.

Используя уравнения (1) – (5), вычислим упругие параметры для графита.

Таблица 2. Упругие параметры графита

Графит	W_{aa} , Дж/ M^2	W_{ac} , Дж/ M^2	σ_{isa} , МПа	σ_{isc} , МПа	E_a , ГПа	E_c , ГПа
C ($\rho = 2,26$)	3,613	1,323	5740	1370	7,59	3,48
C ($\rho = 1,75$)	2,801	1,026	3750	930	5,88	2,70
C ($\rho = 1,65$)	2,637	0,966	3440	870	5,55	2,55

У графита среднее значение $T_m = 3970$ К и $y_2 = 2,779$ Дж/ m^2 (в формуле 2). Графит с плотностью $\rho = 1,75$ г/ cm^3 относится к пресованным образцам, а с плотностью $\rho = 1,65$ г/ cm^3 относится к продавленным образцам. Из-за этого их механические свойства отличаются как в продольном (например, модуль Юнга $E = E_a$), так и в поперечном направлениях ($E = E_c$) (таблица 2). Модуль Юнга у графита в $10 \div 100$ раз меньше, чем у большинства металлов. Однако величина внутренних напряжений в 2 раза меньше, чем у золота и серебра.

Показано, что рост нанотрещин в твердых телах происходит по закону: $L_{nm} \rightarrow 10^2 L_{\mu m} \rightarrow 10^4 L_c$. Вычислим длину трещин L_{nm} , $L_{\mu m}$, L_c для графита.

Таблица 3. Длина трещин графита.

Графит	L_{nma} , нм	L_{nmc} , нм	$L_{\mu ma}$, нм	$L_{\mu mc}$, нм	L_{ca} , нм	L_{cc} , нм
C	0.90	2.46	90	246	9000	24600
	1.17	3.19	117	319	11700	31900
	1.24	3.39	124	339	12400	33900

Трещины L_{nm} , $L_{\mu m}$, L_c для графита обусловлены их дислокационным взаимодействием.

Для разрушения твердого тела были разработаны силовые, деформационные и энергетические критерии разрушения. Между ними имеется следующая связь [12]:

$$\frac{K_{1c}^2(1-\mu^2)}{E} = 2\delta_{1c}\sigma_B = G_{1c} = J_{1c} = 2\gamma = W_a, \quad (6)$$

где K_{1c} - критический коэффициент интенсивности напряжений, силовой критерий разрушения; E - модуль упругости; μ - коэффициент Пуассона; δ_{1c} - критическое раскрытие в вершине трещины, деформационный критерий разрушения; σ_B - предел прочности; G_{1c} - кри-

тическая интенсивность освобождающейся энергии, энергетический критерий разрушения; J_{1c} - критический джей-интеграл, энергетический критерий разрушения; γ – поверхностная энергия, W_a – энергия адгезии.

При этом:

$$K_{1c} = \sqrt{EJ_{1c}} \quad (7)$$

В случае пластины с трещиной L_c :

$$K_{1c} = \sigma_{is} \sqrt{L_c}, \delta_{1c} = K_{1c}^2 / \sigma_{is} \cdot E \quad (8)$$

Сделаем оценку уравнениям (6) - (8) для графита (таблица 4).

Таблица 4. Критерии разрушения графита

Графит	K_{1Ca} , ГПа м ^{1/2}	K_{1Cc} , ГПа м ^{1/2}	δ_{1Ca} , нм	δ_{1Cc} , нм	σ_{Ba} , МПа	σ_{Bc} , МПа
С	545300	215090	6,1	9,7	296	68
	397500	166470	7,2	11,0	194	47
	381840	160080	7,6	11,6	173	42

Из таблицы 4 ясно, что в поперечном направлении графит разрушить намного легче, чем в продольном. Предложенная формула $L_c = 0.17 \cdot 10^{-5} \cdot M / \rho$, позволяет теоретически определять критическую длину трещин и прочность не только графита, но и углерод-углеродных композиционных материалов, синтез которых важен для применения в атомной технике, авиации, металлургии, космической технике и других отраслях промышленности.

О механизме расщепления графита [13]. Графен представляет собой двумерный однослойный лист sp²-гибридизованных атомов графита, расположенных в форме шестиугольников. Наличие прочных ковалентных σ -связей С-С в плоскости графенового листа в сочетании с π -электронами вне его определяет уникальные физико-химические свойства графена, такие как большая теоретическая удельная поверхность (~ 2600 м²/г), высокая подвижность носителей заряда (~ 200000 см²/В с), высокий модуль Юнга (~ 1000 ГПа), тепловая проводимость (~ 5000 Вт/м К), оптическая прозрачность (~ 97.7%), механическая прочность, химическая стабильность и т. д. Чтобы получить графен из графита существует несколько методов:

1. Механическое расщепление [14].

2. Термическое расщепление [15].
3. Ультразвуковое расщепление [16].
4. Химическое расщепление [17].
5. Химическое осаждение из паровой фазы (CVD) [18].
6. Эпитаксиальный рост [19].
7. Электрохимическая интеркаляция [20].
8. Диссоциативное испарение [21].
9. Плазмоэлектрохимическое расщепление [22].

В итоге: синтез графена и графеноподобных материалов основан на увеличении межплоскостного расстояния, ослаблении сил взаимодействия между графитовыми слоями с последующим расслаиванием графита.

Построим теоретическую модель графита, представив его в форме цилиндра конечных размеров. Компоненты термоупругих напряжений по радиусу r - σ_r и вдоль оси z - σ_z - слоя R(l), будем оценивать с помощью уравнений:

$$\sigma_z = -2G \frac{\partial T}{\partial z}. \quad (9)$$

$$\sigma_r = -2G \frac{1}{r} \frac{\partial T}{\partial r}. \quad (10)$$

Здесь модуль сдвига G определяется выражением:

$$2G = \frac{E}{1+\mu}, \quad (11)$$

где E - модуль Юнга, μ - коэффициент Пуассона.

Для графита $E = 8,8$ ГПа, $\mu = 0,22$, а значит $2G = 7,21$ ГПа. Из уравнений (9) и (11) нам нужно определить градиенты температуры. Чтобы рассчитать напряжения в слое R(l), когда идет процесс расщепления графита, то мы приходим к задаче с подвижной границей раздела фаз, которая носит название – проблема Стефана.

В этом случае нестационарное уравнение теплопроводности в подвижной цилиндрической системе координат, движущейся по закону $\beta(t)$, имеет вид:

$$\frac{\partial T}{\partial t} = D \left[\frac{\partial^2 T}{\partial z^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial T}{\partial r} \right) \right], \quad (12)$$

где D - коэффициент температуропроводности.

Коэффициент теплового расширения графена имеет минимум при комнатной температуре и составляет величину $-3.7 \cdot 10^{-6} \text{ K}^{-1}$, которое по величине в три раза превышает коэффициент теплового расширения графита в плоскости при той же температуре ($-1.3 \cdot 10^{-6} \text{ K}^{-1}$).

Начальное и граничные условия выберем в общем виде:

$$\begin{aligned} T(r, z, t)|_{t=0} &= \Phi(r, z), \\ T(r, z, t)|_{r=R} &= \gamma(z, t), \\ T(r, z, t)|_{z=0} &= \gamma_1(r, t), \\ T(r, z, t)|_{z=\beta(t)} &= \gamma_2(r, t). \end{aligned}$$

Функции $\beta(t)$, $\Phi(r, z)$, $\gamma(z, t)$, $\gamma_1(r, t)$ и $\gamma_2(r, t)$ будем считать непрерывными. Решение задачи ищем в виде:

$$T(r, z, t) = \sum_{k=0}^{\infty} \bar{T}_k(z, t) I_0(\lambda_{ок} r), \quad (13)$$

где $\lambda_{ок}$ - корни уравнения $I_0(\lambda_{ок} R) = 0$
и $I_0(\lambda_{ок} R)$ - функция Бесселя нулевого порядка, удовлетворяющая уравнению:

$$\frac{1}{r} \frac{d}{dr} \left[r \frac{dI(\lambda_{ок} r)}{dr} \right] + I_0(\lambda_{ок} r) = 0, \quad (14)$$

$$\bar{T}_k(z, t) = \int_0^R T_k(r, z, t) I_0(\lambda_{ок} r) r dr. \quad (15)$$

Окончательное решение этой задачи выглядит так:

$$\begin{aligned} T(r, z, t) &= \sum_{k=0}^{\infty} J_0(\lambda_{ок} r) \left\{ e^{-\lambda^2 t} \left[\frac{1}{2\sqrt{\pi D}} \int_0^t e^{-\frac{(z-\xi)^2}{4Dt}} dt \right. \right. \\ &\times \left(\int_0^R \phi(r, \xi) I_0(\lambda_{ок} r) r dr \right) d\xi + \frac{R I_1(\lambda_{ок} R)}{2\sqrt{\pi D}} \int_0^t \int_0^t \frac{\gamma(\xi, \tau)}{\sqrt{t-\tau}} e^{-\lambda^2 t} e^{-\frac{(z-\xi)^2}{4D(t-\tau)}} d\xi + \\ &\left. \left. + \frac{1}{4\sqrt{\pi}} \int_0^t \frac{z}{[\lambda(t-\tau)]^{3/2}} e^{-\frac{z^2}{4\lambda(t-\tau)}} K_1(\tau) d\tau + \frac{1}{4\sqrt{\pi}} \int_0^t \frac{z-\beta(\tau)}{[\lambda(t-\tau)]^{3/2}} e^{-\frac{[z-\beta(\tau)]^2}{4\lambda(t-\tau)}} K_2(\tau) d\tau \right] \right\}. \quad (16) \end{aligned}$$

В уравнении (16): $D = \lambda/C_p$ ρ - коэффициент температуропроводности, λ - теплопроводность, C_p - удельная теплоемкость, ρ - плотность. Для графита при $T = 300$ К: $\lambda = 195$ Вт/м К; $C_p = 710$ Дж/кг К; $\rho = 1910$ кг/м³; $D = 1,44 \cdot 10^{-4}$ м²/с.

Если время t очень большое, то в результате мы получим:

$$T(r, z, t) = \frac{\lambda^{3/2} \cdot T_0}{\pi^2} J_0\left(\frac{2r}{R}\right) \cdot \frac{t}{z\beta(t)}, \quad (17)$$

Воспользуемся асимптотическим представлением функций Бесселя, тогда компоненты термоупругих напряжений по радиусу r - σ_r будут иметь вид:

$$\sigma_r = \frac{4D^{3/2} \cdot T \cdot G \cdot \sqrt{r \cdot R}}{\pi^2 \cdot r} \cdot \frac{t}{z\beta(t)} \quad (18)$$

Примем $r = R$, $z = \beta(t)$, тогда получим:

$$\sigma_r = \frac{4D^{3/2} \cdot T \cdot G}{\pi^2} \cdot \frac{t}{\beta(t)^2} = \frac{80D^{3/2} \cdot G}{\pi^2} \approx 8D^{3/2} \cdot G. \quad (19)$$

Компоненты термоупругих напряжений для графита $\sigma_r = 0,24$ МПа, которые образуются на межфазной границе, разделяющей слой R(l) от остального объема и намного меньше $\sigma_{вс} = 68$ МПа из таблицы 4. Это значит, что термически расщепить графит простым нагреванием не удастся. Согласно основам термоупругости термоупругие напряжения на границе раздела фаз можно определить по формуле: $\sigma_r = \alpha E_c \Delta T$, $\alpha = \text{const}$. Константа α нигде не определялась, поэтому мы определим ее используя данные из табл. 2 и приведенное выше значение σ_r . В результате получим:

$$\sigma_r = 10^{-2} \beta^2 \cdot E_c \cdot \Delta T, \quad (20)$$

где β – коэффициент линейного расширения.

Уравнение (20) показывает, что можно расщепить графит, используя для нагрева импульсный пикосекундный лазер ($\beta^2 \sim 10^{-12}$) типа Nd-YAG. Этот подход реализуется сравнительно недавно [23]. Полученные результаты показывают, что механически значительно проще получить графен, нежели меняя градиент температуры.

О механизме расщепления графита водными растворами [24, 25]. В работе [24] нами предлагается модель вязкости жидкостей, в которой рассматривается жидкость, как система взаимодействующих молекул, погруженная в термостат, представляющая собой весь объем жидкости. Квантовые переходы, обусловленные взаимодействием молекул с термостатом, будут диссипативными (с вероятностью P) в отличие от взаимодействия с внешним (например, электрическим) полем (с вероятностью F). Диссипативные процессы приводят к тому, что вторичное поле Z_2 всегда меньше первичного Z_1 . Поскольку подсистема молекул обменивается с термостатом только энергией, то соответствующий им ансамбль частиц будет каноническим. Теоретически рассчитана функция отклика и построена модель, которая в работе [25] использована для определения механизма расщепления графита водными растворами. В работе [8] получены экспериментальные результаты, свидетельствующие об интеркаляции графита микрокластерной водой (МКВ) в электрическом

полях (рисунок 6) с образованием графеновых наноструктур.

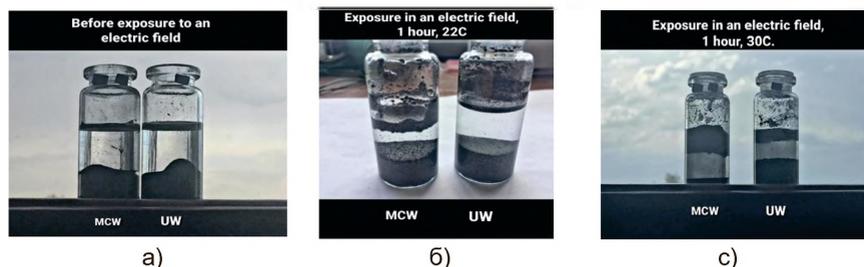


Рисунок 6 – Сосуды с графитом до воздействия электрического поля. Слева находится МКВ, справа- дистиллированная (а); Сосуды с графитом после воздействия поля 500 В, 50 Гц, 80 минут при 22 °С (б); Слева сосуд с графитом в МКВ, справа в дистиллированной воде после электрического поля при 30 °С (с) [8].

Поскольку в дистиллированной воде никаких изменений не наблюдалось, в работе [8] делается вывод, что происходит интеркаляция «микрочластеров» в межслойное пространство графита, вызывая его расширение от 3,44 Å до 6 Å и при длительном воздействии увеличивая это расширение в некоторых местах. На рисунке 4б эти же сосуды после 80 минут экспозиции в переменном электрическом поле 500 В (частота 50 Гц). Температура комнаты 22 °С. Видно, что уровень МКВ уменьшился (сосуд слева), причем объем уменьшения, сопоставим с объемом графита, что говорит о том, что произошло внедрение МКВ в значительную часть межслойного пространства графита. Визуально наблюдается, что частицы графита разбухли, что также подтверждает факт эффективного внедрения воды в межслойное пространство. Повторный эксперимент, проведенный при температуре 30 °С, привел к тому, что графит расслоился, с образованием обильной черной пены, которая всплыла над водой (рисунок 4с). Поскольку плотность графена с толщиной пластин до 4 нм составляет 40 г/литр, с толщиной до 10 нм составляет 260 г/л, то можно предположить, что пена состоит из графена. Таким образом, незначительное увеличение температуры привело к тому, что разбухший графит начал расслаиваться с выносом слоев на поверхность воды (смотри, формулы (19) и (20)).

В двух Патентах (Lorenzen L.H.) более 20 лет тому назад описан процесс получения микрочластерной воды (МКФ) [26, 27]. МКФ, полученную таким способом, мы использовали в своих экспериментах. Во многих работах [28, 33]. утверждается, что во всем диапазоне температур от 0 до 100 °С вода имеет кластерную структуру. Оценки

показывают, что основная доля молекул воды (до 99%) находится внутри кластеров. Кластеры представляют собой твердые конструкции. Энергия связи молекулы воды с кластером в ~ 3.5 раза превосходит теплоту плавления льда, отнесенную к одной молекуле. Время жизни молекулы в составе кластера существенно больше времени тепловых колебаний молекул в твердом теле.

При расщеплении графита водными растворами не учитывались трещины, которые образуются в любом твердом теле, полученного любым способом в природе или искусственным путем. Это обусловлено наличием поверхности у твердого тела и связанного с ней поверхностного слоя, толщина которого составляет 2-6 нм и отлична от свойств остального объема (смотри, выше).

Рассмотрим модель транспортного потока водного раствора через графит, помещенного в цилиндрический стакан в центробежном или ультразвуковом полях. Водный раствор плотностью $\rho(r,z,t)$, который движется по зависимости $\beta(t)$ в цилиндре с соответствующей системой координат, может быть описан уравнением диффузии:

$$\frac{\partial \rho(r, z, t)}{\partial t} = D \left[\frac{\partial^2 \rho(r, z, t)}{\partial z^2} + \frac{1}{r} \cdot \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial \rho(r, z, t)}{\partial r} \right) \right] \quad (21)$$

где D – коэффициент диффузии раствора.

Условия на границе и начальное условие выберем в виде:

$$\begin{aligned} \rho(r, z, t) \Big|_{t=0} &= \varphi(r, z), \\ \rho(r, z, t) \Big|_{r=R} &= \gamma(z, t), \\ \rho(r, z, t) \Big|_{z=0} &= \gamma_1(r, t), \\ \rho(r, z, t) \Big|_{z=\beta(t)} &= \gamma_2(r, t), \end{aligned} \quad (22)$$

Задача (21)- (22) математически похожа на нашу задачу (12) (см., выше). Решая ее аналогичным образом, с учетом некоторых деталей окончательно получим:

$$\begin{aligned} \rho(r, z, t) = & J_0 \left(\frac{2r}{R} \right) e^{-a^2 t} \left\{ \frac{e^2 J_0 \left(\frac{2r}{R} \right)}{16a^3} \ln t + \frac{LJ_1 \left(\frac{2r}{R} \right)}{16a^3} e^{-a^2 t} \ln(t-1) + \right. \\ & \left. + \left(1 - \frac{1}{\sqrt{t}} \right) \left(\frac{a^2}{z\pi} + \frac{a^3}{\pi^2 z \beta(t)} \right) + \left(1 - \frac{1}{\sqrt{t}} \right) \frac{2a}{\sqrt{\pi}} \frac{1}{[z - \beta(t)]} \right\}, \end{aligned} \quad (23)$$

Если время t очень большое, то в результате мы получим:

$$\rho(r, z, t) = \frac{D^{3/2}}{\pi^2} J_0 \left(\frac{2r}{R} \right) \frac{t}{z \beta(t)}, \quad (24)$$

Обозначим $z = v t$, где v – скорость движения потока, t – вре-

мя его движения. Движение раздела фаз примем автомодельным $\beta(t) = \beta_0 t$. Воспользуемся асимптотическим представлением функций Бесселя, тогда при $r = R$ окончательно получим:

$$\rho(r, z, t) = \frac{D^{3/2}}{\pi^{5/2}} \cdot \frac{1}{v \cdot \beta_0 \cdot t^2} \quad (25)$$

Выше обозначено $v(z, t)$ скорость раствора в точке z в момент t . Полагая, что $v(z, t)$ зависит только от плотности ρ , имеем, что когда трещина пуста ($\rho = 0$), раствор движется с максимальной скоростью $v = v_{\max}$. При наполнении трещины скорость падает до полной остановки ($v = 0$), когда $\rho = \rho_{\max}$. Математически это будет выглядеть так:

$$\rho = \rho_{\max} \left(1 - \frac{v}{v_{\max}} \right), \quad 0 \leq v \leq v_{\max}. \quad (26)$$

Из формулы (26) видна существенная зависимость плотности потока раствора от коэффициента диффузии, т.е. от ее реологии, который равен, согласно классической теории Ньютона, $D = v$, где v – кинематический коэффициент вязкости.

В качестве функции отклика в [24] возьмем кинематическую вязкость v , тогда будем иметь:

$$v = \frac{kT}{c} \cdot \frac{W}{G^0} \cdot N, \quad (27)$$

где $NkT = PV = (V = 1) = P$ – давление в потоке раствора; W – кинетическая энергия частиц (молекул) раствора $W = m V^2/2$; G^0 – энергия смеси (раствора); $c = \text{const}$, m – масса частиц, V – их скорость. Уравнение (27) примет вид:

$$v = \frac{1}{c} \cdot \frac{P}{2G_{\text{см}}^0} \cdot mV^2. \quad (28)$$

Учитывая, что $G^0 = \gamma S$, S – площадь, получаем следующее уравнение связи вязкости раствора с ее поверхностным натяжением γ :

$$v = \frac{J}{\gamma}, \quad (29)$$

где J – постоянная жидкости при данных термодинамических условиях.

Уравнение (29) справедливо и для графита, по которому поток раствора пропорционален поверхностной энергии графита $\gamma = W_a/2$, где W_a – адгезия графита (табл. 2).

Перепишем формулу (25), учитывая формулу (1), в виде:

$$W_p = 10^3 \cdot \sqrt{\frac{L_c}{M \cdot v \cdot t}} \cdot \frac{L_c}{M \cdot v \cdot t'} \quad (30)$$

Здесь для водных растворов $J = 2 \cdot 10^{-8}$, $\beta_0 = 0,2$.

В формуле (30) все параметры в правой части определяются экспериментально и дают величину W_p . Если величина $W_p > W_{ac} \approx 1 \text{ Дж/м}^2$ (таблица 2), то графит расщепляется.

Таким образом, нами получена модель расщепления графита водными растворами, используя при этом только экспериментальные данные. Подобный подход был использован и для расщепления мусковита $KAl_2(AlSi_3O_{10})(OH)_2$, который также как и графит имеет слоистую структуру и также широко применяется в промышленности и в быту [34].

Дефекты в графене [35, 36]. Графен имеет два типа дефектов [2, 3]: (I) естественные дефекты, известные как внутренние дефекты в графене, такие как дефекты Стоуна – Уэллса, дефекты с одной вакансией, множественные дефекты, линейные дефекты и углеродные адатомы; и (II) физически введенные дефекты, известные как внешние дефекты в графене, которые представляют собой чужие адатомы и инородные примеси.

Моновакансия (SV) или дефект по Шотки представляет собой отсутствие атома или иона в узле кристаллической решетки. Моновакансия имеет структуру 5/9, где новая связь с длиной b_{cv} возникает между парой из трех атомов со висящими связями, образующие пятиугольник со смещением d_{cv} третьего атома из плоскости графена. Энергия образования моновакансий равна $E_{cv} = 7,6-7,9 \text{ эВ}$ и длина вновь образовавшегося связь $b_{cv} = 0,18 - 0,2 \text{ нм}$, миграционный барьер составляет $\Delta E_{cv} = 1,3 \text{ эВ}$ при $100 - 200 \text{ }^\circ\text{C}$ и перемещение вне плоскости $d_{cv} = 0,018 \text{ нм}$. Если взять средние значения E_{cv} , ΔE_{cv} и энергию пересчитать в джоули, то получим $E_{cv} = 12,4 \cdot 10^{-19} \text{ Дж} = 12,4 \cdot 10^{-19} \text{ Н/м}$, $\Delta E_{cv} = 2,1 \cdot 10^{-19} \text{ Дж} = 2,1 \cdot 10^{-19} \text{ Н/м}$. Сила образования моновакансий равна $F_{cv} = E_{cv}/b_{cv} = 12,4 \cdot 10^{-19} \text{ Н/м} / 1,9 \cdot 10^{-10} \text{ м} = 6,5 \cdot 10^{-9} \text{ Н}$, Сила перемещения миграционного барьера равна $\Delta F_{cv} = \Delta E_{cv}/d_{cv} = 2,1 \cdot 10^{-19} \text{ Н/м} / 0,18 \cdot 10^{-10} \text{ м} = 11,7 \cdot 10^{-9} \text{ Н}$.

Двойная вакансия (DV) означает либо слияние двух одиночных вакансий (SV) или удаление двух соседних атомов углерода. DV можно реконструировать, в результате чего получится два пятиугольника и один восьмиугольник, обозначенный дефектом 5-8-5. Энергия образования DV равна $E_{dv} = 7,5 \text{ эВ}$ и меньше чем у SV, длина вновь образовавшегося связь $b_{dv} = 0,17 \text{ нм}$. Значения барьера трансформация для перехода 5-8-5 \rightarrow 555-777 равны 5,17 - 5,27 эВ. Все три состояния дивакансии являются стабильными при комнатной температуре.

Дефект DV обусловлен оборванной связью, тогда как дефект 5–8–5 вызывает только локальные деформации. Являясь насыщенным восьмичленным кольцевым соединением, молекула циклооктана $(C_8H_{16})_8$ также имеет неплоскую структуру, похожую на корону или лодку. Поскольку дефект 5–8–5 тоже имеет значительную локальную кривизну, система заменяется на дефект 555–777 или 5555–6–7777 для уменьшения местной кривизны. Три разных реконструированные состояния дивакансии в графене обычно наблюдаются в нём при электронном облучении.

Удаление более двух атомов углерода, известное как множественные дефекты или мультивакансии, могут привести к более крупному и сложному дефекту. В этом отношении можно было бы ожидать наблюдение более или менее случайный набор вакансий. Поэтому возможна локальная перестройка решетки вокруг мультивакансий и образование случайного набора нешестиугольных многоугольников. Два пятиугольники и один восьмиугольник появляются для реконструированной двойной вакансии, что приводит к отсутствию оборванных связей. Мультивакансии могут быть созданы современными физическими и химическими методами. Результаты исследований показывают, что мультивакансии, чем моновакансии, легче образуются при условии облучения электронами. Расчеты показывают, что энергия образования мультивакансий в графене и углеродных нанотрубках значительно ниже энергии образования моновакансии. Энергия образования дефекта 5555–6–7777 находится между 5–8–5 и 555–777 и составляет около 6 эВ с длиной связи равной 0,23 нм.

В работе [36] мы предлагаем модель, по которой можно сделать оценку барьера $F(l)_{П-Н}$ и напряжения $\sigma(l)_{П-Н}$ Пайерлса – Набарро:

$$\begin{aligned} F(l)_{П-Н} &= \gamma \cdot R(l)/n = \gamma \cdot a, \\ \sigma(l)_{П-Н} &= F(l)_{П-Н}/S = \gamma/a = E \cdot \varepsilon(l), \end{aligned} \quad (31)$$

где n – число слоев в слое $R(l)$; a – постоянная решетки; S – площадь барьера (a^2), $\sigma(l)_{П-Н}$ – напряжения Пайерлса – Набарро; E – модуль Юнга; ε представляет относительное удлинение параметра решетки в направлении действия внешней силы F .

Предложенная модель согласуются с численными моделями, предложенными в работах [37-40]. В случае графена $R(l) = a = 0,246$ нм, $n = 1$, $\gamma = 0,7$ $T_m = (T_m = 4510 \text{ K}) = 3,157 \text{ мДж/м}^2$.

Используя уравнения (1) – (5) и (31) вычислим энергетические параметры графена и вакансий в графене (таблица 5).

Таблица 5. Параметры графена и вакансий в графене

Параметр	$F(l)_{\text{ПН}}, 10^{-9} \text{ Н}$	$\sigma(l)_{\text{ПН}}, \text{ МПа}$	$F_{\text{CV}}, 10^{-9} \text{ Н}$	$\sigma(l)_{\text{CV}}, \text{ МПа}$	$F_{\text{DV}}, 10^{-9} \text{ Н}$	$\sigma(l)_{\text{DV}}, \text{ МПа}$	$F_{\text{D}}, 10^{-9} \text{ Н}$	$\sigma(l)_{\text{D}}, \text{ МПа}$
Графен	0,26	4268	-	-	-	-	-	-
Моновакансия	-	-	0,65	36111	-	-	-	-
Дивакансия	-	-	-	-	0,44	25872	-	-
Дефект 5555–6–7777	-	-	-	-	-	-	0,26	11304

Из таблицы 5 следует, что напряжения Пайерлса – Набарро у чистого графена $\sigma(l)_{\text{ПН}} = 4,3 \text{ ГПа}$ и затем уменьшается с возрастанием количества дефектов. Такое значение напряжения Пайерлса – Набарро приводит к короблению листов чистого графена. В графене создаваемая перечисленными выше дефектами деформация $\sigma(l)$ квазидвумерной решетки может индуцировать сильные псевдомагнитные поля, способствовать появлению новых уровней Ландау, парамагнитных центров и оказывать существенное влияние на электронные характеристики. Из табл. 5 следует, что барьер Пайерлса – Набарро для чистого графена $F(l)_{\text{ПН}} = 0,26 \cdot 10^{-9} \text{ Н}$, а для типичной стали $F(l)_{\text{ПН}} = 0,5 \cdot 10^{-9} \text{ Н}$. Моновакансия обладает большим барьером Пайерлса – Набарро, хотя и образуются непросто. Барьер Пайерлса – Набарро является тормозом движения дислокаций в металлах и приводит к его упрочнению. Дефекты в графене, которые могут быть тормозом движения дислокаций, легче образуются при условии облучения электронами. Перемещение моновакансий вне плоскости графена равно (смотри выше) $d_{\text{CV}} = 0,018 \text{ нм}$ и, следовательно, $d_{\text{DV}} = 0,027 \text{ нм}$ и $d_{\text{D}} = 0,046 \text{ нм}$ (таблица 5). Во многих работах установлено, что источником дислокаций в графене являются так называемые дефекты Стоуна-Уэльса, которые образуются в результате поворота связи С–С на угол 90° , в результате чего в гексагональной решетке возникают два пятиугольника и два семиугольника. Передвигаются дислокации путем скольжения или переползания со скоростью $\sim 0.1 \text{ нм/мин}$. Каждая дислокация создает в своей окрестности поле деформаций, которое распространяется на $\sim 1 \text{ нм}$.

На сегодняшний день существуют несколько механизмов торможения дислокаций, которые можно разделить на две группы.

Первая группа обсуждает торможение дислокаций за счет наличия в кристаллах потенциальных барьеров, обусловленных различными структурными дефектами, включая барьер Пайерлса – Набарро. Вторая группа обсуждает торможение дислокаций за счет наличия в кристаллах динамического взаимодействия. К нему относятся взаимодействие с электронами, с фононами, с экситонами, магнонами и прочими элементарными возбуждениями кристаллической решетки. Роль последних возбуждений для большинства кристаллов незначительна, но наиболее значительно взаимодействие с фононами. Как показано нами барьер Пайерлса – Набарро в графене максимален для моновакансии.

Выводы. Исследованию графена за 20 лет посвящено огромное количество статей, диссертаций и монографий, число которых будет возрастать по мере использования графена в различных областях человеческой деятельности. Графен относится к наноматериалам, исследование которых начато лишь в конце XX века и продолжается до сих пор.

Описанный нами метод получения графена жидкофазной эксфолиацией графита является принципиально новым и отличается от ранее используемых простотой, дешевизной и абсолютной экологичностью. Однако, жидкости не имеющих упорядоченной структуры, характеризуются неприятным для построения их теории свойством - средняя кинетическая энергия E , приходящаяся на одну молекулу, по порядку величины равна потенциальной энергии U . Из-за отсутствия малого параметра, по которому было бы удобно проводить разложение, не существует строгой теории применительно к жидкостям, такой, как, например, к твердому телу ($E/U \ll 1$) или газу ($E/U \gg 1$).

В XX и XXI столетии на смену строгим результатам пришли компьютерные модели. Анализ предложенных в статье моделей возможен только с помощью вычислительной техники методами искусственного интеллекта (ИИ). Для предложенных моделей создаем ИИ (совместно с представителями других ВУЗов) на основе анализа контрольных параметров рабочего раствора как по визуальным параметрам, так и сравнением характеристик спектров комбинационного рассеяния света. Если он подтверждает качество графена - процесс закончен, если нет, то процесс продолжается, или выбраковывается.

Список литературы

1 *Novoselov K.S., Geim A.K., Morozov S.V., Jiang D., Zhang Y., Dubonos S.V., Grigorieva I.V., Firsov A.A.* Electric field effect in atomically thin carbon films // *Science*, 2004, V. 306, № 5696. - P. 666-669.

2 *Zhang T.* *Graphene. From Theory to Applications.* – Springer, 2022. – 142 p.

3 *Gupta R.K.* (Editor) *3D Graphene. Fundamentals, Synthesis and Emerging Applications.* – Springer, 2023. – 441 p.

4 *Ермагамбет Б.Т., Казанкапова М.К., Касенов Б.К., Айтмагамбетова А.Ж., Куанышбеков Е.Е.* Синтез графеносодержащих наноматериалов на основе кокса методом электродугового разряда // *Химия твердого топлива*, 2021, № 6. - С. 28-40.

5 *Жангозин К.Н., Жанабергенов Т.К., Каргин Д.Б.* О новом методе получения порошкового графена // *Вестник ЕНУ им. Л. Гумилёва*, 2021, том 136, №3. – С. 8-16.

6 *Жангозин К.Н., Кешуов С.А., Жанабергенов Т.К.* «Способ получения графена». Республика Казахстан, Патент 35840, 28 07 2021.

7 *Жангозин К.Н., Кешуов С.А., Жанабергенов Т.К.* «Получение графена». Республика Казахстан, Патент 6985, 28 07 2021.

8 *Жангозин К.Н.* Новый метод получения графена интеркаляцией графита микрокластерной водой. - Алматы: Darkhan, 2023. – 102 с.

9 *Yurov V., Zhangozin K.* Surface layer thickness, defects and strength of graphite // *The scientific heritage*, 2023, No 128. – P. 20-27.

10 *Жмуриков Е.И., Бубненко И.А., Дрёмов В.В., Самарин С.И., Покровский А.С., Харьков Д.В.* Графит в науке и ядерной технике. – Новосибирск, 2013. – 193 с.

11 *Bundy F.P., Bassett W.A., Weathers M.S., et al.* The Pressure-Temperature Phase and Transformation Diagram for Carbon; Updated Through 1994 // *Carbon*, 1996, V. 34, N 2. - P. 141-153.

12 *Ерасов В.С., Орешко Е.И.* Причины зависимости механических характеристик трещиностойкости материала от размеров образца // *Авиационные материалы и технологии*, 2018, №3(52). – С. 56-64.

13 *Yurov V., Zhangozin K.* About the mechanism of graphite splitting // *International independent scientific journal*, 2024, №58. – P. 29-40.

14 *Новоселов К.С.* Графен: материалы Флатландии // *Успехи физических наук*, 2011, Т. 181, № 12. - С. 1299-1311.

15 Van Noorden R. *Production: Beyond sticky tape* // Nature, 2012, V. 483, № 7389. - P. S32-S33.

16 Hernandez Y., Nicolosi V., Lotya M., Blighe F.M., Sun Z.Y., De S., McGovern I.T., Holland B., Byrne M., Gun'ko Y.K., Boland J.J., Niraj P., Duesberg G., Krishnamurthy S., Goodhue R., Hutchison J., Scardaci V., Ferrari A. C. High-yield production of graphene by liquid-phase exfoliation of graphite // Nature Nanotechnology, 2008, V. 3, № 9. - P. 563-568.

17 Wu Y.H., Yu T., Shen Z.X. Two-dimensional carbon nanostructures: Fundamental properties, synthesis, characterization, and potential applications // Journal of Applied Physics, 2010, V. 108, № 7, 071301.

18 Kim K.S., Zhao Y., Jang H., Lee S.Y., Kim J.M., Kim K.S., Ahn J.H., Kim P., Choi J.Y., Hong B. H. Large-scale pattern growth of graphene films for stretchable transparent electrodes // Nature, 2009, V. 457, № 7230. - P. 706-710.

19 Sutter P.W., Flege J.-I., Sutter E.A. Epitaxial graphene on ruthenium // Nature. mater., 2008, V. 7, N. 5. - P. 406-411.

20 Никифоров А.А., Кондратенко М.С., Капитанова О.О., Галлямов М.О. Электрохимическое расщепление графита в сверхкритических средах // ДАН РАН. Химия, науки о материалах, 2020, том 492-493. - С. 128-133.

21 Лебедев С.П. Получение графена методом диссоциативного испарения (сублимации) поверхности SiC и исследование свойств структур графен/SiC. - Диссертация кандидата физ.-мат. наук, Санкт-Петербург, 2021. - 164 с.

22 Кочергин В.К. Бесплатиновые катализаторы восстановления кислорода для топливных элементов на основе плазмозлектрохимически расщепленного графита. - Автореферат кандидата химических наук, Москва, 2022. - 26 с.

23 Кононенко Т.В. Лазерно-индуцированные графитизированные микроструктуры в объеме алмаза. - Диссертация доктора физико-математических наук, Москва, 2022. - 196 с.

24 Yurov V., Zhangozin K. Some questions of the theory of solution viscosity // German International Journal of Modern Science, 2023, №71. - P. 34-41.

25 Yurov V.M., Zhangozin K.N. At the mechanism of graphite splitting bouby aqueous solutions // Znanstvena misel journal, 2024, №86. - P. 41-49.

26 Lorenzen L.H. Process for preparing microclustered water. Patent Number: 5,711,95. Date of Patent: Jan. 27, 1998.

27 *Lorenzen L.H.* Microclustered water. Patent Number: 6,033,678. Date of Patent: Mar. 7, 2000.

28 *Nilsson A., Pettersson L.G.M.* Perspective on the structure of liquid water // *Chemical Physics*, 2011, V. 389. – P. 1-34.

29 *Игнатов И., Мосин О.В., Великов Б.* Математические модели, описывающие структуру воды // Интернет-журнал «Науковедение». 2013. №3. – С. 1-26.

30 *Chen M, Ko H.-Yu, Remsing R.C. and etc.* Ab initio theory and modeling of water // *PNAS*, 2017, Vol. 114, No. 41. – P. 1-12.

31 *Chaplin M.F.* Structure and Properties of Water in its Various States. *Encyclopedia of Water: Science, Technology, and Society*, edited by Patricia A. Maurice, 2019. – P. 1-19.

32 *Захаров С.Д., Мосягина И.В.* Кластерная структура воды (обзор). Препринт Физический ин-т им. П.Н. Лебедева РАН. – Москва, 2011. – 24 с.

33 *Полянская А.В., Полянский А.М., Полянский В.А.* Связь явлений переноса с характеристиками кластерной структуры воды // *Журнал технической физики*, 2019, том 89, вып. 6. – С. 958-964.

34 *Yurov V., Zhangozin K.* About the mechanism of mica splitting // *Sciences of Europe*, 2024, № 133. – P. 97-104.

35 *Yurov V., Zhangozin K.* On the question of stone-wales defects in graphene // *International independent scientific journal*, 2024, №58. – P. 42-53.

36 *Yurov V., Zhangozin K.* Barrier Peierls - Nabarro and migration monovacancies and multivacancies in grapheme // *Norwegian Journal of development of the International Science*, 2024, No 124. – P. 91-95.

37 *Усатенко О.В., Горбач А.В., Ковалев А.С.* Энергия и барьер Пайерлса дислокации (кинка) Френкеля-Конторовой // *ФТТ*, 2001, том 43, вып. 7. – С. 1202-1206.

38 *Гринберг Б.А., Иванов М.А., Кругликов Н.А., Антонова О.В.* О возможности автоблокировки дислокаций в различных материалах // *ФММ*, 2009, том. 108, №1. – С. 93-104.

39 *Фан Т., Луо Л., Ма Л., Танг Б., Пенг Л., Динг В.* Исследование полных а-дислокаций в чистом магнии на основе первичных принципов // *ПМТ*, 2014, Т. 55, N4. – С. 141-151.

40 *Петухов Б.В.* Динамика дислокаций в твердых растворах ковалентных кристаллов // *ФТТ*, 2016, том 58, вып. 9. – С. 1764-1768.

References

- 1 *Novoselov K.S., Geim A.K., Morozov S.V., Jiang D., Zhang Y., Dubonos S.V., Grigorieva V., Firsov A.A.* Electric field effect in atomically thin carbon films // *Science*, 2004, V. 306, № 5696. - P. 666-669.
- 2 *Zhang T.* *Graphene. From Theory to Applications.* - Springer, 2022. - 142 p.
- 3 *Gupta R.K.* (Editor) *3D Graphene. Fundamentals, Synthesis and Emerging Applications.* - Springer, 2023. - 441 p.
- 4 *Ermagambet B.T., Kazankapova M.K., Kasenov B.K., Ajtmagambetova A.Zh., Kuany`shbekov E.E.* Sintez grafenosoderzhashhikh nanomaterialov na osnove koksa metodom e`lektrodugovogo razryada // *Khimiya tverdogo topliva*, 2021, № 6. - S. 28-40.
- 5 *Zhangozin K.N., Zhanabergenov T.K., Kargin D.B.* O novom metode polucheniya poroshkovogo grafena // *Vestnik ENU im. L. Gumilyova*, 2021, tom 136, № 3. - S. 8-16.
- 6 *Zhangozin K.N., Keshuov S.A., Zhanabergenov T.K.* «Sposob polucheniya grafena». Respublika Kazakhstan, Patent 35840, 28 07 2021.
- 7 *Zhangozin K.N., Keshuov S.A., Zhanabergenov T.K.* «Poluchenie grafena». Respublika Kazakhstan, Patent 6985, 28 07 2021.
- 8 *Zhangozin K.N.* Novy`j metod polucheniya grafena interkalyacziej grafita mikroklasternoj vodoj. - Almaty` : Darkhan, 2023. - 102 s.
- 9 *Yurov V., Zhangozin K.* Surface layer thickness, defects and strength of graphite // *The scientific heritage*, 2023, № 128. - P. 20-27.
- 10 *Zhmurikov E.I., Bubnenkov I.A., Dryomov V.V., Samarin S.I., Pokrovskij A.S., Khar`kov D.V.* Grafit v nauke i yadernoj tekhnike. - Novosibirsk, 2013. - 193 s.
- 11 *Bundy F.P., Bassett W.A., Weathers M.S., et al.* The Pressure-Temperature Phase and Transformation Diagram for Carbon; Updated Through 1994 // *Carbon*, 1996, V. 34, N 2. - P. 141-153.
- 12 *Erasov V.S., Oreshko E.I.* Prichiny` zavisimosti mekhanicheskikh kharakteristik treshhinostojkosti materiala ot razmerov obrazca // *Aviacionny`e materialy` i tekhnologii*, 2018, №3(52). - S. 56-64.
- 13 *Yurov V., Zhangozin K.* About the mechanism of graphite splitting // *International independent scientific journal*, 2024, №58. - P. 29-40.
- 14 *Novoselov K. S.* *Grafen: materialy` Flatlandii* // *Uspekhi fizicheskikh nauk*, 2011, T. 181, № 12 - S. 1299-1311.
- 15 *Van Noorden R.* *Production: Beyond sticky tape* // *Nature*, 2012, V. 483, № 7389. - P. S32-S33.

16 Hernandez Y., Nicolosi V., Lotya M., Blighe F.M., Sun Z.Y., De S., McGovern I.T., Holland B., Byrne M., Gun'ko Y.K., Boland J.J., Niraj P., Duesberg G., Krishnamurthy S., Goodhue R., Hutchison J., Scardaci V., Ferrari A. C. High-yield production of graphene by liquid-phase exfoliation of graphite // *Nature Nanotechnology*, 2008, V. 3, № 9. - P. 563-568.

17 Wu Y.H., Yu T., Shen Z.X. Two-dimensional carbon nanostructures: Fundamental properties, synthesis, characterization, and potential applications // *Journal of Applied Physics*, 2010, V. 108, № 7, 071301.

18 Kim K.S., Zhao Y., Jang H., Lee S.Y., Kim J.M., Kim K.S., Ahn J.H., Kim P., Choi J.Y., Hong B. H. Large-scale pattern growth of graphene films for stretchable transparent electrodes // *Nature*, 2009, V. 457, № 7230. - P. 706-710.

19 Sutter P.W., Flege J.-I., Sutter E.A. Epitaxial graphene on ruthenium // *Nature. mater.*, 2008, V. 7, N. 5. - P. 406-411.

20 Nikiforov A.A., Kondratenko M.S., Kapitanova O.O., Gallyamov M.O. E`lektrokhimicheskoe rasshheplenie grafita v sverkhkriticheskikh sredakh // DAN RAN. Khimiya, nauki o materialakh, 2020, tom 492-493. - S. 128-133.

21 Lebedev S.P. Poluchenie grafena metodom dissocziativnogo ispareniya (sublimaczii) poverkhnosti SiC i issledovanie svojstv struktur grafen/SiC. - Dissertaczija kandidata fiz.-mat. nauk, Sankt-Peterburg, 2021. - 164 s.

22 Kochergin V.K. Besplatinovy`e katalizatory` vosstanovleniya kisloroda dlya toplivny`kh e`lementov na osnove plazmoe`lektrokhimicheski rasshheplennogo grafita. - Avtoreferat kandidata khimicheskikh nauk, Moskva, 2022. - 26 s.

23 Kononenko T.V. Lazerno-induczirovanny`e grafitizirovanny`e mikrostruktury` v ob`eme almaza. - Dissertaczija doktora fiziko-matematicheskikh nauk, Moskva, 2022. - 196 s.

24 Yurov V., Zhangozin K. Some questions of the theory of solution viscosity // *German International Journal of Modern Science*, 2023, №71. - P. 34-41.

25 Yurov V.M., Zhangozin K.N. At the mechanism of graphite splitting bouby aqueous solutions // *Znanstvena misel journal*, 2024, №86. - P. 41-49.

26 Lorenzen L.H. Process for preparing microclustered water. Patent Number: 5,711,95. Date of Patent: Jan. 27, 1998.

27 Lorenzen L.H. Microclustered water. Patent Number: 6,033,678. Date of Patent: Mar. 7, 2000.

28 Nilsson A., Pettersson L.G.M. Perspective on the structure of liquid water // *Chemical Physics*, 2011, V. 389. - P. 1-34.

29 Ignatov I., Mosin O.V., Velikov B. Matematicheskie modeli, opisy` vayushhie strukturu vody` // *Internet-zhurnal «Naukovedenie»*. 2013. №3. - С. 1-26.

30 Chen M, Ko H.-Yu, Remsing R.C. and etc. Ab initio theory and modeling of water // *PNAS*, 2017, Vol. 114, No. 41. - P. 1-12.

31 Chaplin M.F. Structure and Properties of Water in its Various States. *Encyclopedia of Water: Science, Technology, and Society*, edited by Patricia A. Maurice, 2019. - P. 1-19.

32 Zakharov S.D., Mosyagina I.V. Klasternaya struktura vody` (obzor). Preprint Fizicheskij in-t im. P.N. Lebedeva RAN. - Moskva, 2011. - 24 s.

33 Polyanskaya A.V., Polyanskij A.M., Polyanskij V.A. Svyaz` yavlenij perenosa s kharakteristikami klasternoj struktury` vody` // *Zhurnal tekhnicheskoy fiziki*, 2019, tom 89, vy` p. 6. - S. 958-964.

34 Yurov V., Zhangozin K. About the mechanism of mica splitting // *Sciences of Europe*, 2024, № 133. - P. 97-104.

35 Yurov V., Zhangozin K. On the question of stone-weles defects in graphene // *International independent scientific journal*, 2024, №58. - P. 42-53.

36 Yurov V., Zhangozin K. Barrier Peierls - Nabarro and migration monovacancies and multivacancies in grapheme // *Norwegian Journal of development of the International Science*, 2024, No 124. - P. 91-95.

37 Usatenko O.V., Gorbach A.V., Kovalev A.S. E`nergiya i bar`er Pajerlsa dislokaczii (kinka) Frenkelya-Kontorovoj // *FTT*, 2001, tom 43, vy` p. 7. - S. 1202-1206.

38 Grinberg B.A., Ivanov M.A., Kruglikov N.A., Antonova O.V. O vozmozhnosti avtoblokirovki dislokaczij v razlichny`kh materialakh // *FMM*, 2009, tom. 108, №1. - S. 93-104.

39 Fan T., Luo L., Ma L., Tang B., Peng L., Ding V. Issledovanie polny`kh a-dislokaczij v chistom magnii na osnove pervichny`kh princzipov // *PMT*, 2014, T. 55, N4. - S. 141-151.

40 Petukhov B.V. Dinamika dislokaczij v tverdy`kh rastvorakh kovalentny`kh kristallov // *FTT*, 2016, tom 58, vy` p. 9. - S. 1764-1768.

Авторлар туралы мәліметтер

Юров Виктор Михайлович – физика-математика ғылымдарының кандидаты, «Восток» доценті, г. Астана, Қарағанды, Қазақстан.
e-mail: exciton@list.ru

Жанғозин Қанат Накошұлы – физика-математика ғылымдарының кандидаты, доцент «Восток», Астана, Қарағанды, Қазақстан.
e-mail: 4kzh@mail.ru

Жаңабергенов Тимурхан Құдайбергенұлы – PhD докторы «Шығыс», г. Астана, Қарағанды, Қазақстан. e-mail: timur@parasat.com.kz

Қаргин Жұмат Бейсенбекұлы – физика-математика ғылымдарының кандидаты, Л.Н.Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университетінің доценті. Астана қ., Қазақстан. e-mail: kargin_db@enu.kz.

Сведения об авторах

Юров Виктор Михайлович - кандидат физико-математических наук, доцент «Восток», г. Астана, Караганда, Казахстан. e-mail: exciton@list.ru

Жангозин Канат Накошевич – кандидат физико-математических наук, доцент «Восток», г. Астана, Караганда, Казахстан. e-mail: 4kzh@mail.ru

Жанабергенов Тимурхан Кудайбергенович - доктор PhD «Восток», г. Астана, Караганда, Казахстан. e-mail: timur@parasat.com.kz

Каргин Джумат Бейсенбекович - кандидат физико-математических наук, доцент Евразийский национальный университет им. Л.Н.Гумилева, г. Астана, Казахстан. e-mail: kargin_db@enu.kz.

Information about the authors

Yurov Viktor Mikhailovich - candidate of physical and mathematical sciences, associate professor “Vostok”, g. Astana, Karaganda, Kazakhstan.
e-mail: exciton@list.ru

Zhangozin Kanat Nakoshevich – candidate of physical and mathematical sciences, associate professor “Vostok”, Astana, Karaganda, Kazakhstan.
e-mail: 4kzh@mail.ru

Zhanabergenov Timurkhan Kudaibergenovich - PhD Doctor “East”, g. Astana, Karaganda, Kazakhstan. e-mail: timur@parasat.com.kz

Kargin Jumat Beisenbekovich - Candidate of Physical and Mathematical Sciences, Associate Professor Eurasian National University. L.N. Gumileva, g. Astana, Kazakhstan. e-mail: kargin_db@enu.kz