Взаимосвязь магнитных свойств фторированных графитов и организации фтора вдоль слоёв материала

Гребёнкина М.А. [1] , *Пинаков Д.В.* [1] , *Лавров А.Н.* [1] , *Булушева Л.Г.* [1] , *Окотруб А.В.* [1]

grebenkina@niic.nsc.ru
[1] ИНХ СО РАН, Новосибирск, Россия

Фторирование графита позволяет модулировать свойства конечного материала в зависимости от содержания фтора и характера его распределения по слоям графита. Слоистая структура материала делает возможным проникновение в межслоевое пространство посторонних молекул с образованием интеркалированных соединений фторированных графитов. Подобные структуры представляют интерес для электрохимии и газовых сенсоров.

Магнитные свойства фторированного графита чувствительны к степени фторирования материала, организации атомов фтора на слоях, а также к взаимодействию матрицы фторированного графита и внедрённых молекул. Выделение компонент, образующих магнитную восприимчивость фторированных графитов, позволяет соотнести магнитные свойства со структурными особенностями материала.

В настоящей работе были исследованы магнитные свойства фторированных графитов CF_x, где $0.04 < x < 0.52$. Исследованные образцы были получены путём выдерживания графита в парах смеси брома и трифторида брома при комнатной температуре. Показано, что магнитные свойства фторированных графитов образованы диамагнетизмом Ланжевена атомов фтора и углерода, парамагнетизмом Паули, парамагнетизмом Кюри-Вейсса и орбитальным диамагнетизмом. Орбитальный диамагнетизм обеспечивает характерную температурную зависимость диамагнетизма графитоподобных материалов и связан с присутствием обширной сопряжённой π-системы. По результатам моделирования магнитной восприимчивости константа Кюри не зависит от содержания фтора, что может быть связано с тем, что атомы фтора организованы в группы в виде кластеров или цепочек, а парамагнитные центры создают только атомы фтора, расположенные по краям таких структур. Полученная зависимость величины орбитального диамагнетизма от содержания фтора продемонстрировала постепенное уменьшение величины данного вклада при увеличении степени фторирования. Для степеней фторирования $x \geq 0.3$ орбитальный диамагнетизм становится незначительным на фоне остальных вкладов, т.е. для таких материалов ароматическая система в значительной степени разбита атомами фтора. Также было выявлено отсутствие влияния внедрённых молекул на данную составляющую восприимчивости. Моделирование распределения атомов фтора по слоям графита [1] и соотнесение полученных результатов с магнитными свойствами позволило установить зависимость между размером ароматической системы и величиной диамагнитного вклада, что делает возможным оценку размера сопряжённой π-системы во фторированных графитах по результатам магнитных измерений.

Авторы благодарят Министерство науки и высшего образования Российской Федерации, проект 121031700314-5.

Ссылки

1. R. D. Yamaletdinov, Y. A. Nikiforov, L. G. Bulusheva, A. V. Okotrub, Nanoscale (2021) 13, 1206.