

PACS numbers: 61.43.Hv, 61.48.Gh, 61.50.Ah, 61.50.Nw, 81.05.ue

Модель стереоизомеров — графена и нитрида бора

В. В. Гарбуз

*Институт проблем материаловедения им. И. Н. Францевича НАН Украины,
ул. Кржижановского, 3,
03680, ГСП, Киев, Украина*

Предложена плоскостная модель пространственных изомеров графенового слоя углерода и нитрида бора, наноразмерных частиц $t\text{-C}_r$ и $t\text{-BN}_r$, периметрически симметричная главной оси 6_3 -порядка. Проведен сравнительный анализ геометрических (по Слэйтеру) и силовых (по Оллреду–Рохову) характеристик химической связи в плоскости sp^2 -гибридизации инертной поверхности и химически активного периметра атомов С, пары В и N, а также атомов Н и О. Модель содержит уровни: образования, упорядочения, периметрического гидролиза, дегидратации, потери стехиометрии по азоту, где $V/N > 1$, фрактальной фрагментации симметрично оси 3-порядка и полного разложения. Установлена зависимость состава и среднего диаметра частиц от степени центросимметричной макроциклизации частиц $t\text{-BN}_r$, соответствующая натуральному ряду целых чисел (n). Качественные экспериментальные данные РФА, ИК-спектроскопии, а также состава $t\text{-BN}_r$ гармонично согласуются в рамках предложенной модели.

Запропоновано плаский периметричний модель стереоізомерів графенового шару вуглецю та нітриду бору, нанорозмірних частинок $t\text{-C}_r$ та $t\text{-BN}_r$, симетричний головній вісі 6_3 -порядку. Виконано порівняльну аналізу геометричних (за Слейтером) та силових (за Оллредом–Роховим) характеристик хемічного зв'язку в площині sp^2 -гібридизації інертної поверхні та хемічно активного периметра атомів С, пари В і N, а також атомів Н та О. Модель містить рівні: утворення, впорядкування, периметричної гідролізи, дегідратації, втрати стехіометрії по азоту, де $V/N > 1$, фрактальної фрагментації симетрично вісі 3-го порядку та повного розкладу. Встановлено залежність складу та середнього діаметра частинок від ступеня центросиметричної макроциклізації частинок $t\text{-BN}_r$, що відповідає натуральному ряду цілих чисел (n). Якісні експериментальні дані РФА, ІЧ-спектроскопії, а також складу $t\text{-BN}_r$ гармонійно узгоджуються у рамках запропонованого моделю.

The plane model of graphene layer of stereoisomers of carbon and boron nitride such as nanosize $t\text{-C}_r$ and $t\text{-BN}_r$ particles, which is perimetricaly sym-

metric about main axis of the 6_3 -degree is proposed. Comparative analysis of the geometric (by Slater) and force (by Allreds–Rokhow) parameters of chemical bonding in plane of sp^2 -hybridization of the inert surface and reactionary active perimeter of C atoms, pair of B and N atoms, and H and O atoms. Model has several levels such as: formation, ordering, perimetrical hydrolysis, dehydration, losses of stoichiometry by nitrogen, where $B/N > 1$, fractal fragmentation symmetrically about third degree axis, and complete decomposition. Dependence of composition and average diameter of particles on degree of centrosymmetric macrocyclization of $t\text{-BN}_r$ particles is revealed. This dependence corresponds to positive integers. Qualitative experimental data of x-ray analysis, IR-spectrometry and $t\text{-BN}_r$ composition show close agreement within the framework of the presented model.

Ключевые слова: модель, стереоизомеры, графен, BN.

(Получено 15 апреля 2010 г.)

1. ВВЕДЕНИЕ

Наноразмерные порошки графитоподобного нитрида бора с трехмерной неупорядоченной (турбостратной) структурой $t\text{-BN}_r$ являются сырьем для получения наноразмерных порошков наиболее плотной сфалеритоподобной фазы $t\text{-BN}_r$ при высокотемпературном ударном сжатии по диффузному механизму фазового превращения [1].

Отсутствие отражений hkl и асимметрия полос отражения hk на рентгенограммах порошков свидетельствует о двухмерности структуры $t\text{-BN}_r$ [2].

Увеличение степени трехмерной упорядоченности структуры $t\text{-BN}_r$ приводит к увеличению выхода продуктов фазового превращения с вюрцитоподобной структурой BN_v при ВТУС, проходящему по мартенситному механизму [2].

Двухмерность структуры сочетается с известными особенностями химического состава порошков $t\text{-BN}_r$. Они характеризуются заниженным содержанием массовой доли (X_E , % масс.) основных элементов X_B и X_N по сравнению с расчетными данными ($X_{\text{Втеор.}}$ — 43,6% масс. и $X_{\text{Nтеор.}}$ — 56,4% масс.) соединения BN. Содержание кислорода в стехиометрических и избыточных по бору порошках $t\text{-BN}_r$, где соотношение $X_B/X_N \geq 0,771$ составляет $X_O = 3,5\text{--}19,0\%$ масс., водорода и углерода X_C и $X_H \sim 0,40 \pm 0,20\%$ масс. [3]. ИК-спектры образцов содержат полосы поглощения внутривибрационных и межвибрационных колебаний кристаллической решетки $t\text{-BN}_r$ $\nu(\text{BN})$, асимметричных и симметричных колебаний $\nu(\text{OBO})$ и $\nu(\text{OBN})$, деформационных и валентных колебаний $\delta(\text{NH})$ и $\delta(\text{OH})$, $\nu(\text{NH})$ и $\nu(\text{OH})$ [4, 5]. Посторонних фаз и твердых растворов в порошках $t\text{-BN}_r$ по данным рентгенографии [6] обнаружено не было. Влияние B_2O_3 , других фаз, твердых растворов, примесей кислорода

на фазовые превращения BN_r было изучено при высокотемпературном статическом сжатии (ВТСС) [7–9], а также в условиях ВТУС [5, 6]. Полученные результаты имеют адекватный кинетический характер причин, вызывающих эти превращения. Так введение B_2O_3 в исходную шихту $t\text{-BN}_r$ при ВТУС в отличие от ВТСС [8], резко снизило выход плотной фазы [5].

В связи с этим представляло интерес обобщить полученные результаты в рамках единой модели, а также установить связь величины двухмерных частиц и столь необычного состава порошков $t\text{-BN}_r$ с некоторым существенным параметром структуры этих частиц.

В настоящей работе представлена плоская модель пространственных изомеров структурных единиц (СЕ) наноразмерной системы (НРС) — толщиной моноатомного слоя (МАС) $t\text{-C}_r$ и $t\text{-BN}_r$.

Рассмотрены сравнительные геометрические и силовые характеристики химической связи внутренних и краевых атомов стереоизомеров углерода и нитрида бора, (МАС) $t\text{-C}_r$ и $t\text{-BN}_r$.

Обсуждены электростатические предпосылки трехмерного упорядочения графеновых слоев $t\text{-C}_r$ и нескольких МАС $t\text{-BN}_r$ в графитоподобный наноразмерный пакет (ГНПП) $t\text{-C}_r$ и $t\text{-BN}_r$. Показаны причины стабилизации разупорядоченной структуры $t\text{-BN}_r$.

Предложен параметр макроциклизации n , который связывает размеры (МАС) $t\text{-BN}_r$ и его химический состав.

2. ПОСТРОЕНИЕ МОДЕЛИ

В качестве исходных, при решении поставленной задачи, были использованы данные и положения 1)–3) о структуре и свойствах стереоизомера $t\text{-BN}_r$ — графенового слоя $t\text{-C}_r$ в активированных углях, приведенные в работах [11–13]:

1) необратимая адсорбция кислорода графеном, прошедшего вакуумную термическую обработку (ВТО), осуществляется выше минус 40°C ; последующее выделение кислорода происходит в виде CO/CO_2 ;

2) поверхность графена $t\text{-C}_r$ является химически инертной;

3) химическое взаимодействие кислорода (и других элементов) происходит с периферийными атомами графена.

При построении модели был использован главный элемент симметрии пространственных групп $\text{C}_r \bar{p}6_3/mmc$ и $\text{BN}_r p6_3/mmc$ — ось 6_3 , перпендикулярная графеновому слою $t\text{-C}_r$ и МАС $t\text{-BN}_r$ (рис. 1 а, б).

Как видно из рис. 1, а, все химически активные атомы (радикалы с неспаренными электронами [11]) графенового слоя, вписанного в правильный шестиугольник, принадлежат геометрическому месту точек сторон этого шестиугольника. МАС $t\text{-C}_r$ — продукт радикальных цепных реакций полимеризации атомов в виде сопряженных концентрических макроциклов в плоскости sp^2 -гибридизации уг-

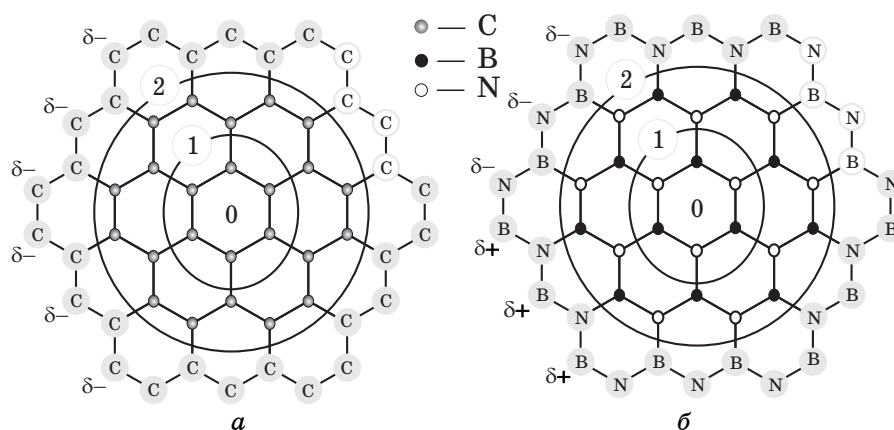


Рис. 1. Схемы моделей плоских частиц $t\text{-C}_r$ и $t\text{-BN}$ со степенью макроциклизации $n = 2$.

лерода [14].

По месту нахождения эти атомы принадлежат внешнему периметру (p) шестиугольника МАС $t\text{-C}_r$. В общем случае $p \sim \pi d_{\text{а.ср.}}$, где $d_{\text{а.ср.}}$ — средний диаметр, который определяется, как основная размерная характеристика плоских частиц МАС $t\text{-C}_r$ (нм) по данным РФА в области когерентности [2].

С учетом степени макроциклизации (СМЦ) графена, численно равной 0, 1, 2, ..., n (рис. 1, а), размер диагонали частицы складывается из суммы внутри слоевых рентгенографических параметров «а» (нм). Средний диаметр графена при этом меньше диагонали на величину $\cos\beta$, как катет и гипотенуза в прямоугольном треугольнике, составляющими угол $30'$.

Аналитическое выражение величины среднего диаметра частицы графена имеет вид:

$$d_{\text{а.ср.}} = a \cos\beta (2n + 1). \quad (1)$$

Число атомов углерода, составляющих частицу $t\text{-C}_r$, подчиняется закону арифметической прогрессии, где

$$N_{(\text{C})} = 6\Sigma(2n + 1). \quad (2)$$

Максимальное количество мостиковых атомов кислорода (2–), связывающих неспаренные электроны периметрических атомов углерода, увеличивается по уравнению прямой линии и равно:

$$N_{(\text{O})} = 6n. \quad (3)$$

Молекулярная масса оксида графена равна:

$$M_{t-C_r} = N_{(C)}A_{(C)} + N_{(O)}A_{(O)}, \quad (4)$$

где $A_{(C)}$ и $A_{(O)}$ — атомные массы углерода и кислорода.

Переменный в зависимости от n состав и размер оксида графена вычисляется из уравнения (1), а также

$$X_C = N_{(C)}A_{(C)} \cdot 100\% / M_{t-C_r}, \quad (5)$$

$$X_O = N_{(O)}A_{(O)} \cdot 100\% / M_{t-C_r}, \quad (6)$$

где X_C и X_O — массовые доли (масс.%) углерода и кислорода соответственно.

Очевидно, использование уравнений аналогичных (1), (5) и (6) переводит модель в целом из графической формы в вычислительную. Это дает возможность при необходимости изучить вычислительными методами состав, размеры и технологические свойства реальных материалов с минимальным объемом данных литературы или эксперимента. Вычисление позволило обнаружить явление размерного фактора состава плоских, изоструктурных частиц оксида графена (табл. 1) и нитрида бора, которое внешне похоже на размерный фак-

ТАБЛИЦА 1. Зависимость содержания кислорода и размера частиц от степени макроциклизации (СМЦ) графена.

№№ пп.	Степень макроциклизации	$X_O \pm 0,1\%$ (масс. доля)	$d_{a.c.p.}$, нм
1	0	0	0,2
2	1	25,0	0,7
3	2	19,5	1,5
4	3	15,4	2,4
5	4	12,6	3,3
6	5	10,6	4,2
7	6	9,2	5,0
8	7	8,1	5,9
9	8	7,2	6,8
10	9	6,5	7,7
11	10	5,9	8,6
12	11	5,5	9,4
13	13	4,7	11,2
14	15	4,1	12,9
15	17	3,7	14,7
16	19	3,3	16,4
17	21	3,0	18,2

тор физических свойств наносистем по Гляйтеру [15].

Размерный фактор состава является достаточным условием стабилизации периметра двумерных частиц за счет присоединения кислорода (нового компонента). Необходимым условием стабильности графена $t\text{-C}_r$ и его изомеров является положение 2) [11] — инертность поверхности в плоскости sp^2 -гибридизации образующих атомов.

Графитоподобный наноразмерный пакет ГНРП $t\text{-C}_r$ [16] состоит из нескольких МАС $t\text{-C}_r$, как результат их трехмерного упорядочения и связывания части неспаренных электронов периметрических углеродных радикалов. Оставшиеся химически активные атомы углерода находятся на боковой поверхности шестигранных призм, условно вставленных друг в друга на величину сдвига соседних МАС $t\text{-C}_r$ [2], в виде фрагментированных шестиугольных периметров, отстоящих друг от друга на величину межслоевого расстояния, с толщиной МАС $t\text{-C}_r$.

Отсюда складывается некоторая закономерность уровней существования определенных систем.

Стабильность наноразмерной системы в k -мерном пространстве обусловлена заключением собственных активных центров в геометрическое место точек $(k - 1)$ -мерного пространства.

Для объемных систем активные центры собраны на поверхности. В двумерных системах с толщиной моноатомного слоя — на линии, фрагментированном периметре или цикле. Для одномерных систем, линейных и разветвляющихся — на концевых точках. В случае циклических, замкнутых систем — 0 (ноль). Для неизвестных точечных систем — неопределенность.

Образование $t\text{-BN}_r$ из боратной кислоты и карбамида при ступенчатом нагревании в атмосфере аммиака имеет сложный многоступенчатый характер [17, 18]. С учетом исходных веществ и конечных продуктов реакции взаимодействие бора и азота можно представить, как процесс поликонденсации (МАС) $t\text{-BN}_r$ связанный с декарбоксилированием в виде оксидов углерода (2+ и 4+) (CO/CO_2) и дегидратацией исходных продуктов продолжительное время при высоких температурах [3]. В этих условиях, наряду с параллельными реакциями [3], возможно прохождение обратных процессов, таких как взаимодействие с перегретыми парами воды, частичное температурное гидролитическое разложение продуктов реакции, особенно периферийных атомов бора и азота.

Поликонденсация МАС $t\text{-BN}_r$ (с выделением газообразных веществ), происходит в виде концентрических сопряженных макроциклов атомов В и N в плоскости, пространственно аналогичной графеновому слою $t\text{-C}_r$, симметрично главной оси 6_z , перпендикулярной этой плоскости.

Схематическое изображение МАС $t\text{-BN}_r$ с двумя сопряженными

макроциклами ($n = 1, 2$) представлено на рис. 1, б. За начало отсчета, состояние ($n = 0$), выбрана условная шестичленная циклическая молекула $(\text{BN})_3$ с последовательным чередованием атомов $\text{B}(3+)$ и $\text{N}(3-)$, как $-\text{B}=\text{N}-$ и $=\text{B}-\text{N}=-$. В возбужденном состоянии, при раскрытии двойных связей, она способна присоединить первый и последующие сопряженные макроциклы атомов бора и азота.

3. СВОЙСТВА МОДЕЛИ И ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ

Как видно из рис. 1, а, б, при условии концентрического роста перпендикулярно главной кристаллографической оси, МАС $t\text{-BN}_r$ пространственно аналогичен МАС $t\text{-C}_r$. В силу гетероатомности слоя их свойства имеют различия, которые могут быть оценены с помощью величин электроотрицательностей атомов (χ_A) по Оллреду–Рохову [19]. Предложенная система χ_A имеет физический смысл силы, с которой атом с эффективным зарядом, вследствие экранирования ядра невалентными электронами, в данной степени окисления притягивает электрон на расстоянии ковалентного радиуса [19]:

$$\chi_A = Z_{\text{эфф.}} e^2 / r_{\text{ков}}^2. \quad (7)$$

Система атомно-ионных радиусов, предложенная Слэйтером в 1965 году, по данным [20] лучшим образом описывает геометрические свойства атомов в кристаллах с сильной химической связью, преимущественно ионного и ковалентного типа. Силовые (χ_A), а также геометрические ($r_{\text{аи}}$) характеристики атомов, принимающих участие в образовании МАС, представлены в табл. 2.

Как видно из табл. 2, полусумма $(\chi_{\text{В}} + \chi_{\text{N}})/2$, а также $(r_{\text{аи В}} + r_{\text{аи N}})/2$ лишь на 0,04 и 0,005 нм больше $\chi_{\text{С}}$ и $r_{\text{аи С}}$ соответственно. Это указывает на близость как геометрических, так и силовых характеристик насыщенной химической связи поверхности МАС $t\text{-C}_r$ и $t\text{-BN}_r$.

Различия свойств МАС $t\text{-C}_r$ и $t\text{-BN}_r$ сосредоточены главным обра-

ТАБЛИЦА 2. Геометрические ($r_{\text{аи}}$) и силовые (χ_A) характеристики атомов, составляющих графеновый и моноатомный слой $t\text{-C}_r$ и $t\text{-BN}_r$.

№№ пп.	Название химического элемента	Степень окисления	Электро- отрицательность χ_A по Оллреду–Рохову [18]	Атомно-ионный радиус $r_{\text{аи}}$ [нм] по Слэйтеру [19]
1	С	IV±	2,50	0,070
2	N	III–	3,07	0,065
3	В	III+	2,01	0,085
4	О	II–	3,50	0,060
5	Н	I+	2,20	0,025

зом на их периферийных периметрах. Оба слоя являются электро-нейтральными в целом. Неспаренные электроны периферийных атомов углерода МАС $t\text{-C}_r$ создают локальный краевой избыток электронной плотности $\Sigma(\delta^-)_i$, который вероятно является одним из исходных факторов чередования смещенных одноатомных слоев $t\text{-C}_r$ при их трехмерном упорядочении в C_r по типу (ABAB ...) [2]. Моноатомный слой $t\text{-BN}_r$ и его краевой периметр также в целом электро-нейтральны. В силу гетероатомного характера слоя и большой разницы в значениях $\Delta\chi_{(N-B)} = 1,06$ (табл.), химически активный фрагментированный периметр МАС $t\text{-BN}_r$ состоит из шести участков с основанием сегментов в 60° чередующихся периметрических атомов азота $\Sigma(\delta^+)_i$ и соответствующих атомов бора $\Sigma(\delta^-)_i$ (рис. 1, б). Отсутствие других химически активных атомов и функциональных групп создает благоприятные предпосылки перекрывания нескольких МАС $t\text{-BN}_r$ в положениях взаимной нейтрализации периметрических областей (рис. 2) согласно уравнению

$$3\Sigma(\delta^-)_i + 3\Sigma(\delta^+)_i = 0. \quad (8)$$

Процесс взаимного стягивания МАС вследствие поворота на 60° вокруг главной оси получает дополнительный фактор упорядоче-

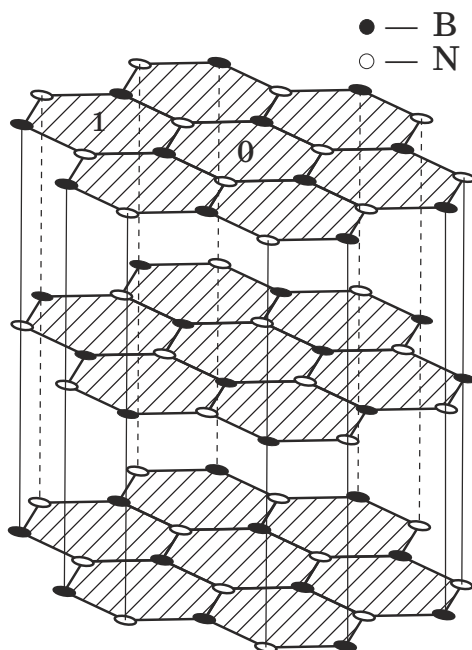


Рис. 2. Образование трехслойного графитоподобного наноразмерного пакета $t\text{-BN}_r$. Степень макроциклизации (СМЦ) частицы $n = 1$.

ния $t\text{-BN}_r$, который выводит трехмерный BN_r за рамки настоящей модели.

Упорядоченный трехмерный наноразмерный пакет BN_r , в результате взаимного связывания соседних фрагментированных периметров атомов бора и азота становится гидрофобным и химически инертным для присоединения других атомов и функциональных групп. Порошки графитоподобного BN_r отличаются реальной двухкомпонентностью, высокой стехиометричностью, химической инертностью и малым содержанием инородных технологических примесей.

Двухмерный МАС $t\text{-BN}_r$ напротив может быть подвержен многостадийному гидролитическому разложению: деформации внешнего периметра, фрагментации симметрично оси 3- порядка, а также гидролитической деструкции, которые будут обсуждены в последующих публикациях.

На первом этапе в присутствии молекул воды, не удаленных из зоны реакции продуктов поликонденсации, к периферийным атомам бора и азота (рис. 3, сегмент I) легко присоединяются гидроксильные группы $\Delta\chi_{(\text{O}-\text{H})} = 1,30$ и протоны $\chi_{\text{H}} = 2,20$ соответственно (табл.; рис. 3, сегмент II). При этом в ИК-спектрах, кроме двух полос $\nu(\text{BN})$, наблюдаются полосы колебаний $\delta(\text{NH})$ и $\delta(\text{OH})$, $\nu(\text{NH})$ и $\nu(\text{OH})$.

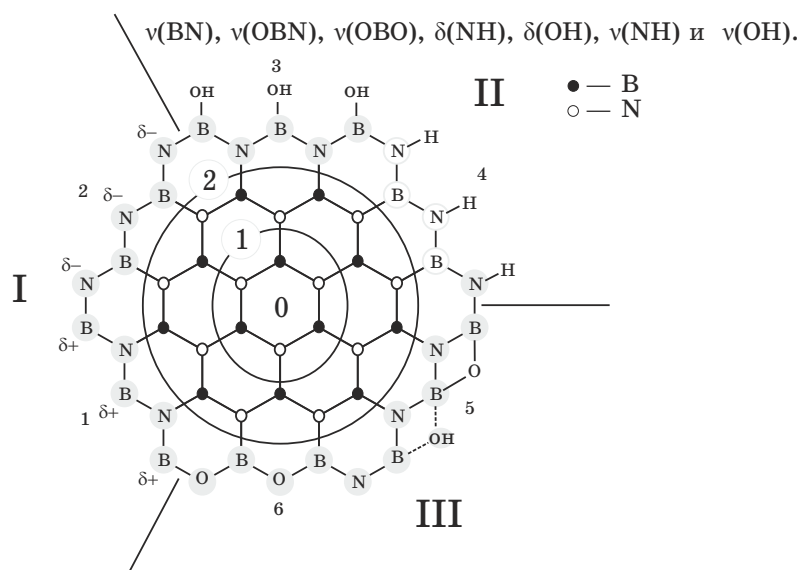


Рис. 3. Состояние периферийных атомов В и N в МАС $t\text{-BN}_r$. I) 1, 2 — в отсутствии атомов и групп присоединения и замещения. II) 3, 4 — гидроксирование бора и гидрирование азота при взаимодействии с водой. III) 5, 6 — дегидратирование бора и термогидролиз азота (возникновение нестехиометрии по бору).

$\nu(\text{OH})$. Нагревание МАС $t\text{-BN}_r$ приводит к дегидратированию периметра МАС $t\text{-BN}_r$. Частичное или полное отщепление ОН-групп приводит к образованию мостиковых оксо- ($-\text{O}-$), $\chi_{\text{O}}/2 = 1,75$ или мостиковых ОН-групп $\Delta\chi_{(\text{O}-\text{H})}/2 = 0,65$ между периферийными атомами бора (рис. 3, сегмент III).

Дегидрирование иминогрупп ($=\text{N}-\text{H}$) на первой стадии стабилизирует имидогруппы за счет частичной делокализации неспаренного электрона азота ($3-$). Полный гидролиз атома азота и отщепление в виде аммиака, приводит к его замене на кислородный мостик. В результате возникает кажущаяся нестехиометрия бора по отношению к азоту, где $\text{B}/\text{N} > 1$ или $X_{\text{B}}/X_{\text{N}} > 0,771$ (рис. 3, сегмент III). В ИК-спектрах при этом наблюдаются колебания $\nu(\text{OBO})$ и $\nu(\text{OBN})$, а также другие представленные в работе [4].

В результате такого взаимодействия на фрагментированных периметрах МАС $t\text{-BN}_r$ исчезают области $\Sigma(\delta+)_i$, а области $\Sigma(\delta-)_i$ взаимно отталкивают соседние МАС. Размеры атомов кислорода ($2-$) и водорода ($1+$) малы (табл.) и не оказывают пространственных затруднений уменьшению межслоевых расстояний. Электростатические причины сохраняют двухмерное состояние и стабилизируют разупорядочение $t\text{-BN}_r$.

Дальнейшее повышение температуры в атмосфере аммиака приводит к очищению фрагментированных периметров МАС $t\text{-BN}_r$. Полусумма $(\chi_{\text{B}} + \chi_{\text{N}})/2 = 2,54$ и $\chi_{\text{C}} = 2,50$ меньше чем полусуммы $(\chi_{\text{B}} + \chi_{\text{O}})/2 = 2,75$ и $(\chi_{\text{C}} + \chi_{\text{O}})/2 = 3,00$. Поэтому кислород, при нагревании $t\text{-BN}_r$, как и в случае активированных углей [11] выделяется в виде летучих оксидов бора ($2+$) и CO/CO_2 соответственно. Оксид бора ($2+$) или BO в газовой фазе впервые был обнаружен Маликеном при изучении полосчатых спектров в 1925 году [21]. Удаление атомов кислорода с внешних периметров $t\text{-BN}_r$ приводит в действие механизм трехмерного фазового превращения в BN_r (рис. 2, 3, сегмент III).

Стабилизация двухмерной структуры порошков $t\text{-BN}_r$ происходит в результате присоединения к периферическим атомам бора ($3+$) третьего компонента, главным образом кислорода ($2-$). Присоединение других продуктов гидролиза и дегидратации к периметрическим атомам бора и азота по данным химического анализа имеет характер примеси [2, 3].

Замещение периферийных атомов азота ($3-$) атомами кислорода ($2-$) вызывает нарушение соотношения $X_{\text{B}}/X_{\text{N}} = 0,771$ и по своему характеру аналогично образованию твердых растворов замещения [5].

Частично упорядоченные порошки (ЧУП) BN_r состоят из трехкомпонентной части с двухмерной структурой, а также двухкомпонентной части с трехмерной структурой. При равенстве всех прочих системных параметров (P, V, T) компонентная разность этих частей

по правилу фаз Гиббса свидетельствует о том, что ЧУП BN_r состоят из двух фаз.

Совокупность экспериментальных результатов о различиях структуры, состава, свойств, а также механизмов (диффузионный и мартенситный) фазовых превращений частично упорядоченных порошков (ЧУП) графитоподобного нитрида бора при ВТУС, по типу (ЧУП) $\text{BN}_r \rightarrow \text{BN}_b + \text{BN}_{\text{сф}}$, подтверждает наличие в них двух фаз.

Существует количественная зависимость состава и размеров МАС от натурального ряда целых чисел, имеющих физический смысл числа сопряженных макроциклов: 0, 1, 2, ..., n , поликонденсированных атомов бора и азота, периметрически симметричных оси 6_3 -порядка (рис. 1, 3), которая будет рассмотрена в следующих публикациях.

4. ВЫВОДЫ

Представлена модель, одноатомного слоя графитоподобного нитрида бора и графенового слоя $t\text{-C}_r$.

Качественные рентгенографические характеристики, ИК-спектроскопии, а также состава $t\text{-BN}_r$ гармонично согласуются в рамках предложенной модели.

ЦИТИРОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА

1. Н. И. Боремчук, В. Б. Зелявский, А. В. Курдюмов, *ДАН СССР*, **306**, № 6: 1381 (1989).
2. А. В. Курдюмов, В. Ф. Бритун, Н. И. Боримчук, В. В. Ярош, *Мартенситные и диффузионные превращения в углероде и нитриде бора при ударном сжатии* (Киев: Куприянова О. О.: 2005).
4. M. Hubáček, T. Sato, and T. Ishii, *J. Solid State Chem.*, **109**: 384 (1994).
5. А. В. Курдюмов, В. Ф. Бритун, В. В. Гарбуз, Т. В. Томила, В. В. Ярош, В. И. Ляшенко, В. Б. Зелявский, *Наноструктурное материаловедение*, № 2: 25 (2009).
6. А. В. Курдюмов, В. Ф. Бритун, А. И. Даниленко, *Наноструктурное материаловедение*, № 1: 9 (2007).
7. F. R. Corrigan and F. P. Bundy, *J. Chem. Phys.*, **63**, No. 9: 3812 (1975).
8. А. М. Мазуренко, А. А. Левченко, П. П. Шиманович, *Сверхтвердые материалы*, № 2: 11 (1982).
9. V. Z. Turkevich, *Diamond and Relat. Mater.*, **8**: 2032 (1999).
10. S. K. Singhal and J. K. Park, *J. Cryst. Growth*, **260**: 217 (2004).
11. H. P. Boehm, *Adv. Catal. and Retal. Subj.*, **16**, No. 8/9: 179 (1966).
12. M. L. Studebaker, E. W. Hoffman, A. C. Wolfe, and L. G. Nabors, *Ind. Fnd. Tng. Chem.*, **48**, No. 1: 162 (1956).
13. Х. П. Бозм, *Катализ. Стереохимия и механизмы органических реакций* (Москва: Мир: 1968).
14. В. В. Гарбуз, В. В. Захаров, *Наноструктурное материаловедение*, № 1: 74

- (2007).
15. В. В. Скороход, І. В. Уварова, А. В. Рагуля, *Фізико-хімічна кінетика в наноструктурних системах* (Київ: Академперіодика: 2001).
 16. А. А. Конкина, *Термо-, жаростойкие и негорючие волокна* (Москва: Химия: 1978).
 17. Т. Я. Косолапова, Т. В. Андреева, Т. С. Бартницкая, *Неметаллические тугоплавкие соединения* (Москва: Металлургия: 1985).
 18. А. В. Курдюмов, Т. С. Бартницкая, В. И. Ляшенко, *Порошковая металлургия*, № 11–12: 88 (2005).
 19. К. Дэй, Д. Селбин, *Теоретическая неорганическая химия* (Москва: Химия: 1976).
 20. Б. К. Вайнштейн, В. М. Фридкин, В. Л. Инденбом, *Современная кристаллография. Структура кристаллов* (Москва: Наука: 1979), т. 2.
 21. Г. Реми, *Курс неорганической химии* (Москва: Изд-во иностр. литературы: 1963), т. 1.