

Pozvánka

na přednášku, která se bude konat 12. dubna 2017 v 10,00 hod v přednáškovém sále Ústavu fyziky materiálů AVČR, Žižkova 22, Brno,.

Program:

doc. Mgr. Jiří Tuček, PhD,

Regionální centrum pokročilých technologií a materiálů a Katedra experimentální fyziky,
Přírodovědecká fakulta, Univerzita Palackého v Olomouci

**Fyzikálně-chemické cesty směrem k magnetickému grafenu pro spintronicke a
medicínské aplikace: Dopace a sp^3 funkcionalizace**

**Strategies to Magnetic Graphene towards Spintronic and Biomedical Applications:
Doping and sp^3 Functionalization**

prof. RNDr. Ludvík Kunc, CSc., d.h.c
Ředitel ústavu

prof. Mgr. Tomáš Kruml, CSc.
předseda Rady instituce

Abstrakt.

Grafen – 2D alotrop uhlíku – stále vzbuzuje významnou pozornost vědecké komunity od jeho izolace v roce 2004. Mimo vynikající elektrickou vodivost a velkou plochu povrchu vykazuje grafen dlouhou dobu života spinových stavů a omezené hyperjemné interakce, což jej činí slibným kandidátem pro potenciální aplikace ve spintronice a medicíně za předpokladu, že se stane magnetickým. Ideální grafen je totiž diamagnetický v důsledku intrinstické sp^2 hybridizace. Proto byly navrženy rozmanité strategie jak vnuknout grafenu magnetické vlastnosti. Z nedávno publikovaných teoretických a experimentálních studií vyplývá, že stabilní magnetické momenty jsou v mřížce grafenu indukovány v důsledku zavedení defektů. Mezi defekty řadíme lokální perturbace topologie, bodové a čárové poruchy, vakance, substituční atomy, adatomy, smíšenou sp^2/sp^3 hybridizaci způsobenou chemickou funkcionalizací a hrany. Aby se ustanovilo dlouhodobě magnetické uspořádání přes mřížku grafenu, je nutné, aby magnetické momenty indukované defekty komunikovaly mezi sebou. Existují nicméně pochybnosti, zda-li medium zprostředkávající magnetické interakce v grafenu je natolik silné, aby udržovalo „magnetickou komunikační cestu“ mezi magnetickými momenty a tím zajistilo stabilitu magnetického uspořádání na dlouhou vzdálenost, které bude samoudržitelné i při relativně vysokých teplotách.

V rámci přednášky budou představeny strategie k vnuknutí magnetických vlastností grafenu zahrnující zejména dopaci mřížky grafenu neuhlíkovými atomy a chemickou funkcionalizací jeho povrchu. Konkrétně bude pozornost věnována dopaci mřížky grafenu atomy síry a dusíku s důrazem na vliv chemické a elektronické povahy dopujícího prvku, koncentrace dopace a strukturních konfigurací indukovaných dopací na vývin magnetických vlastností v grafenu.^{1,2} Rovněž bude představen nový derivát grafenu, tzv. hydroxofluorografen, který je vnímám jako první příklad organického magnetu založeného na grafenu, vykazující magnetické uspořádání na dlouhou vzdálenost, udržitelné až do pokojové teploty v důsledku příhodné sp^3 funkcionalizace povrchu grafenu.³ Experimentálně dosažené výsledky budou kriticky konfrontovány s teoretickými předpověďmi, vyzvedávající významnou roli teoretických modelů k popisu a pochopení magnetického chování materiálů na bázi grafenu.

Reference

1. Tuček, J.; Blonski, P.; Sofér, Z.; Simek, P.; Petr, M.; Pumera, M.; Otyepka, M.; Zboril, R. Sulfur Doping Induces Strong Ferromagnetic Ordering in Graphene: Effect of Concentration and Substitution Mechanism. *Adv. Mater.* **2016**, *28*, 5045-5053. DOI: 10.1002/adma.201600939
2. Blonski, P.; Tuček, J.; Sofér, Z.; Mazánek, V.; Petr, M.; Pumera, M.; Otyepka, M.; Zbořil, R. Doping with Graphitic Nitrogen Triggers Ferromagnetism in Graphene. *J. Am. Chem. Soc.* **2017**, *139*, 3171-3180, DOI: 10.1021/jacs.6b12934.
3. Tuček, J.; Holá, K.; Bourlinos, A. B.; Błoński, P.; Bakandritsos, A.; Ugolotti, J.; Dubecký, M.; Karlický, F.; Ranc, V.; Čépe, K.; Otyepka, M.; Zbořil, R. Room temperature organic magnets derived from sp^3 functionalized graphene. *Nat. Commun.* **2017**, *8*, 14525, DOI: 10.1038/ncomms14525.

Abstract

Graphene, a single two-dimensional sheet of carbon atoms with an arrangement mimicking the honeycomb hexagonal architecture, has captured an immense interest of the scientific community since its isolation in 2004. Besides its extraordinarily high electrical conductivity and surface area, graphene shows a long spin lifetime and limited hyperfine interactions, which favors its potential exploitation in spintronic and biomedical applications, respectively, provided it can be made magnetic. However, pristine graphene is diamagnetic in nature due to solely sp^2 hybridization. Thus, various attempts have been proposed to imprint magnetic features into graphene. Following recent theoretical and experimental studies, it is believed that magnetic moments in graphene evolve only upon introduction of defects into the crystal lattice of graphene. The defects include local topology perturbations, point and line defects, vacancies, non-carbon atoms in the graphene lattice, adatoms, mixed sp^2 - sp^3 hybridization resulting from chemical functionalization, and edges. The defect-induced magnetic moments must communicate with each other if a magnetic ordering is supposed to be established. However, there are doubts if the mediators of the magnetic interactions are sufficiently powerful to maintain the communication pathway and, hence, ensure self-sustainable magnetic ordering over the graphene lattice at relatively high temperatures.

Within the lecture, strategies involving doping of graphene lattice with non-carbon atoms and functionalization of graphene surface will be discussed with respect to the recent theoretical and experimental advancement in the quest for “magnetic” graphene. In particular, the issue of doping of graphene lattice with sulfur and nitrogen will be addressed in details highlighting the effect of the chemical nature and electronic character of the doping element, doping concentration, and doping-induced magnetic configurations on the magnetic properties of graphene.^{1,2} A new magnetically active derivative of graphene, hydroxofluorographene, will be introduced as the first example of the organic graphene-based magnets with a magnetic ordering sustainable up to room temperature due to suitable sp^3 functionalization.³ Experimental observations will be critically confronted with theoretical predictions, highlighting a significant role of the theoretical models for description and understanding of magnetic behavior of graphene-based materials.

References

1. Tuček, J.; Blonski, P.; Sofer, Z.; Simek, P.; Petr, M.; Pumera, M.; Otyepka, M.; Zboril, R. Sulfur Doping Induces Strong Ferromagnetic Ordering in Graphene: Effect of Concentration and Substitution Mechanism. *Adv. Mater.* **2016**, *28*, 5045-5053. DOI: 10.1002/adma.201600939
2. Blonski, P.; Tuček, J.; Sofer, Z.; Mazánek, V.; Petr, M.; Pumera, M.; Otyepka, M.; Zbořil, R. Doping with Graphitic Nitrogen Triggers Ferromagnetism in Graphene. *J. Am. Chem. Soc.* **2017**, *139*, 3171-3180, DOI: 10.1021/jacs.6b12934.
3. Tuček, J.; Holá, K.; Bourlinos, A. B.; Błoński, P.; Bakandritsos, A.; Ugolotti, J.; Dubecký, M.; Karlický, F.; Ranc, V.; Čépe, K.; Otyepka, M.; Zbořil, R. Room temperature organic magnets derived from sp^3 functionalized graphene. *Nat. Commun.* **2017**, *8*, 14525, DOI: 10.1038/ncomms14525.