

УДК 539.21

ИССЛЕДОВАНИЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ УГЛЕРОДНЫХ КЛАСТЕРОВ С ГРАФЕНОМ

доц. Х.И.Исаев, доц. И.Д.Ядгаров, с.н.с., В.Г.Стельмах*
Ташкентский институт текстильной и легкой промышленности
*Ташкентский государственный технический университет

Графен сиртига 12 ва 13 та атомли айланма углерод кластерларнинг турли холатдаги чуқиши компьютерда моделлаштириши усулида аниқланди. Чуқиши характери ва энергияси графен ҳамда чуқаётган кластерларнинг ўзаро жойлашишига боғлиқлиги олинди.

Методом компьютерного моделирования были определены разные случаи адсорбции 12 и 13-атомных круговых углеродных кластеров на графене. Получено, что характер и энергия адсорбции зависят от взаимного расположения этих адсорбированных кластеров и графена.

By computer simulation different cases of adsorption of 12 and 13 atomic carbon ringlike clusters on graphene have been identified. It was found that the nature and energy of adsorption depend on the relative position of these adsorbed cluster and graphene.

Термин графен первоначально указывал на абстрактную модель, обозначающую один слой атомов графита, которые ни с чем не взаимодействуют. Уже при тех теоретических работах стало ясно, что графен, будь он в реальности, обладал бы рядом уникальных свойств, например, высокая электропроводность и теплопроводность. В 2004 году А. Гейм с сотрудниками получили в лабораторных условиях графен [1], таким образом, термин графен стал указывать не только на абстрактную модель, но и на реальный объект природы. Как реальный объект природы графен взаимодействует с окружающей средой и, в частности, с атомами, молекулами и кластерами и поэтому существует большое количество работ, рассматривающих взаимодействие графена с атомами, молекулами и кластерами. [2]. В нашей работе основное внимание уделено энергии химической адсорбции круговых углеродных кластеров C_{12} и C_{13} в результате их взаимодействия с графеном.

Сначала методом минимизации энергии был смоделирован 12 и 13-атомные углеродные круговые кластеры C_{12} и C_{13} . Для описания межатомного взаимодействия в этих кластерах использовался потенциал Бреннера второго поколения [2], который очень хорошо описывает углерод-углеродное взаимодействие в органических молекулах. Затем, используя метод минимизации энергии с тем же потенциалом, была построена компьютерная модель графена. Компьютерная модель графена представляла собой прямоугольный участок графена, состоящего из 272 атомов углерода, лежащих в одной плоскости и имеющих гексагональную структуру. После создания графена и кластеров C_{12} и C_{13} изучалась адсорбция этих кластеров на графен. Начальные положения C_{12} и C_{13} были заданы под углом $\varphi=0^\circ, 15^\circ, 30^\circ, 45^\circ, 60^\circ, 75^\circ$ и 90° , где угол φ – это угол между нормалью к плоскости графена и плоскостью, в которой находится кластер. Место взаимодействия круговых кластеров C_{12} и C_{13} выбиралось в центре прямоугольного участка графена для того, чтобы минимально было влияние кругового кластера на краевые атомы участка графена, что способствует тому, что общие результаты близки к взаимодействию этих круговых кластеров с обычным графеном.

При поиске минимума энергии в алгоритме программы заложен запрет на разрыв большого количества связей, что может быть, например, при возникновении вакансии атома в графене. Поэтому есть такие первоначальные углы, которые назовём

неудачными, при которых компьютерное моделирование не определяло конечную конфигурацию атомов. Для C_{12} и C_{13} эти неудачные углы соответственно 60° и 75° .

В результате взаимодействия круговых кластеров с графеном меняется геометрия этих кластеров и часто атомы кластера лежат уже в не одной плоскости, что не наблюдается у свободных от взаимодействия круговых кластеров. На атомных масштабах как графен так и кластеры являются дискретными, состоящими из атомов, и взаимодействие кластера с графеном происходит путем образования связей некоторых атомов кластера с атомами графена. Эти связи определяют энергию химической адсорбции всего кластера на графене, но эти связи не однозначно определяют энергию когезии как в случае связывания одиночного атома с графеном. Если связывается один атом кластера с графеном, то энергия связи этого атома с графеном хорошо оценивает энергию химической адсорбции всего кластера на графене. В случае, если несколько атомов кластера связываются с атомами графена, мы приводим значение суммы всех энергий связей атомов кластера с атомами графена; это значение суммы энергий мы определяем, как энергию химической адсорбции всего кластера на графене.

Форма графена и энергии связи его атомов также немного меняются в результате взаимодействия с круговыми кластерами C_{12} и C_{13} : форма графена становится волнообразной, однако такого явления как большой изгиб или сворачивание графена не наблюдается.

Таблица 1

Данные об адсорбированных круговых углеродных кластерах C_{12} и C_{13} на графене

Тип кластера	Первоначальный угол наклона (градус)	Энергия химической адсорбции (эВ)	Количество атомов, взаимодействующих с графеном
C_{12}	0	2.32	2
C_{12}	15	3.14	3
C_{12}	30	1.27	1
C_{12}	45	3.82	5
C_{12}	75	2.34	2
C_{12}	90	3.35	3
C_{13}	0	1.10	2
C_{13}	15	5.45	4
C_{13}	30	2.29	2
C_{13}	45	3.16	2
C_{13}	60	2.65	4
C_{13}	90	5.89	5

В таблице 1, приведенной ниже, собраны данные об адсорбированных круговых углеродных кластерах C_{12} и C_{13} на графене. Из этой таблицы следует, что исследуемые нами кластеры C_{12} и C_{13} обычно взаимодействуют с графеном посредством двух или трех своих атомов, хотя возможно взаимодействие посредством одного или даже пяти атомов (см. самый правый столбец таблицы 1). Различается и возможная энергия химической адсорбции кластеров на графене, так максимальные ее значения равны 3.82 и 5.89 электрон-вольт (эВ) соответственно для кластеров C_{12} и C_{13} , тогда как минимальные 1.27 и 1.10 эВ соответственно для кластеров C_{12} и C_{13} . Отметим также, что максимальные энергии химической адсорбции кластеров соответствуют наибольшему количеству атомов кластера, взаимодействующих с графеном. Это наибольшее количество атомов для обоих типов кластеров равно 5.

Использованная литература:

1. K.S.Novoselov, A.K.Geim, S.V.Morozov, D.Jiang, Y.Zhang, S.V.Dubonos, I.V.Grigorieva, and A.A.Firsov, (2004) Electric Field Effect in Atomically Thin Carbon Films. *Science*, 306, 666-669. New York.
2. D.W.Brenner, O.A.Shenderova, J.A.Harrison, S.J.Stuart, Ni B and S.Sinnott. A second-generation reactive empirical bond order (REBO) potential energy expression for hydrocarbons, 2002. *J. Phys.: Condens. Matter* 14, 783-802. USA.