

# КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ РАССЕЯНИЯ ПРИ ПАДЕНИИ АТОМА ВОДОРОДА ПОД ПРЯМЫМ УГЛОМ

Х.И.Жабборов<sup>1</sup>, Ю.А.Баимова<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Научно-исследовательский институт развития цифровых технологий и искусственного интеллекта, г.Ташкент, Узбекистан

<sup>2</sup>Институт проблем сверхпластичности металлов РАН г.Уфа, Россия

Для осуществления компьютерного моделирования использовалась программный пакет LAMMPS, который реализует потенциал AIREBO, хорошо описывающий углеродные структуры [1]. Это программа, использованная нами в работе для моделирования при падении атом водорода на графен по прямому углу. Расстояние от поверхности графена до атома водорода равно  $h = \{10, 20\}$  Å. Подбирались энергии величиной от 0.1 эВ до 500 эВ с шагом 5эВ.

Структура подводилась к заданной температуре 0, 300 или 600 К с применением микроканонического ансамбля NVE [2]. В процессе моделирования атомы Н осаждались на графен в течении времени от 1 пс до 10 пс. В настоящей работе исследован процесс взаимодействия атома водорода с плоскостью графена, в результате чего может быть реализован один из сценариев – адсорбция на листе, прохождение атома водорода с повреждением графена, отскок атома водорода от поверхности графена. Конфигурации моделирования были визуализированы с помощью программного обеспечения Jmol [3].

В результате взаимодействия атомов водорода с графеном водород может рассеиваться, адсорбироваться на графене или проходить сквозь графеновый лист. В настоящее время существует значительное количество теоретических и экспериментальных работ, рассматривающих разные свойства графена, его взаимодействие с отдельными атомами, кластерами или молекулами, но относительно мало работ, рассматривающих вопросы по прохождению атомных частиц сквозь графен. В настоящей работе, используя метод молекулярной динамики, последовательно исследованы процессы адсорбции атомов водорода на поверхности графена, ее повреждения и разрушения, а также их прохождения через графен.

Анализ результатов показал, что процесс разрушения в структуре графена наблюдался при нормальном падении атомов водорода по прицельным точкам над атомом графена в пределах энергий от 57 эВ до 500 эВ ( Рис 1), а при

падении атомов водорода под углом  $45^\circ$  по прицельной точке в центре гексогона, разрушение структуры графена не обнаружилось.

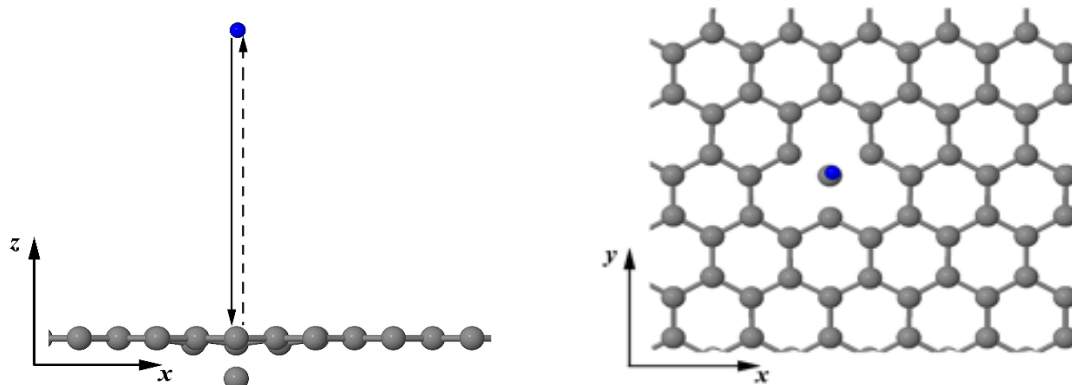


Рис.1. Визуальные представления процесс разрушение при падении атом водорода под прямым углом;

Процесс прохождения, при падении атома водорода на графен под углом  $45^\circ$  по прицельной точке в центре гексагона, наблюдается в интервале энергий от 58 эВ до 500 эВ. За пределами этого промежутка энергии атомы водорода, в основном, отскакивают от графена, прохождение близко к нулю, что указывает на то, что атомы графена сильно взаимодействуют друг с другом.

## ЛИТЕРАТУРА

1. Thomas O'Connor, Jan Andzelm, Mark O Robbins.// AIREBO-M: A reactive model for hydrocarbons at extreme pressures. The Journal of Chemical Physics 2015 142(2):024903. DOI:[10.1063/1.4905549](https://doi.org/10.1063/1.4905549)
2. Y.Umeno, Y.Yachi, M.Sato, H.Shima. On the atomistic energetics of carbon nanotube collapse from AIREBO potential // Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures. Volume 106, February 2019, Pages 319-325. <https://doi.org/10.1016/j.physe.2018.08.006>
3. Robert Hanson. Jmol—A paradigm shift in crystallographic visualization // September 2010. Journal of Applied Crystallography 43(5). DOI:[10.1107/S0021889810030256](https://doi.org/10.1107/S0021889810030256)