

КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ АДСОРБЦИИ ФУЛЛЕРЕНА НА ГРАФЕН

Ф.Ф. Умаров¹, А.Н. Улукмурадов², И.Д. Ядгаров²

И. З. Уролов² И.А. Абдурахманова³

¹Казахстанско-Британский технический университет, Алматы, Казахстан

²Институт ионно-плазменных и лазерных технологий АН РУз. Ташкент, Узбекистан

³Ургенчский государственный университет, Ургенч, Узбекистан

Сначала методом минимизации энергии с использованием потенциала Бреннера второго поколения (REBO), который хорошо описывает углеродные структуры [1], была построена компьютерная модель одиночного бездефектного фуллерена C_{60} и было получено, что энергия когезии E_f каждого атома углерода в фуллерене равна 6.8 электрон-вольт (эВ). Затем таким же методом минимизации энергии с использованием потенциала Бреннера с наложением периодических условий на граничные атомы была получена компьютерная модель бесконечного бездефектного графена с расстоянием между ближайшими его атомами 1.42 ангстрем (Å) и с энергией когезии E_g каждого его атома 7.4 эВ. Сам факт, что $E_g > E_f$ указывает на то, что «бесконечный» бездефектный графен более прочная структура, чем бездефектный фуллерен C_{60} .

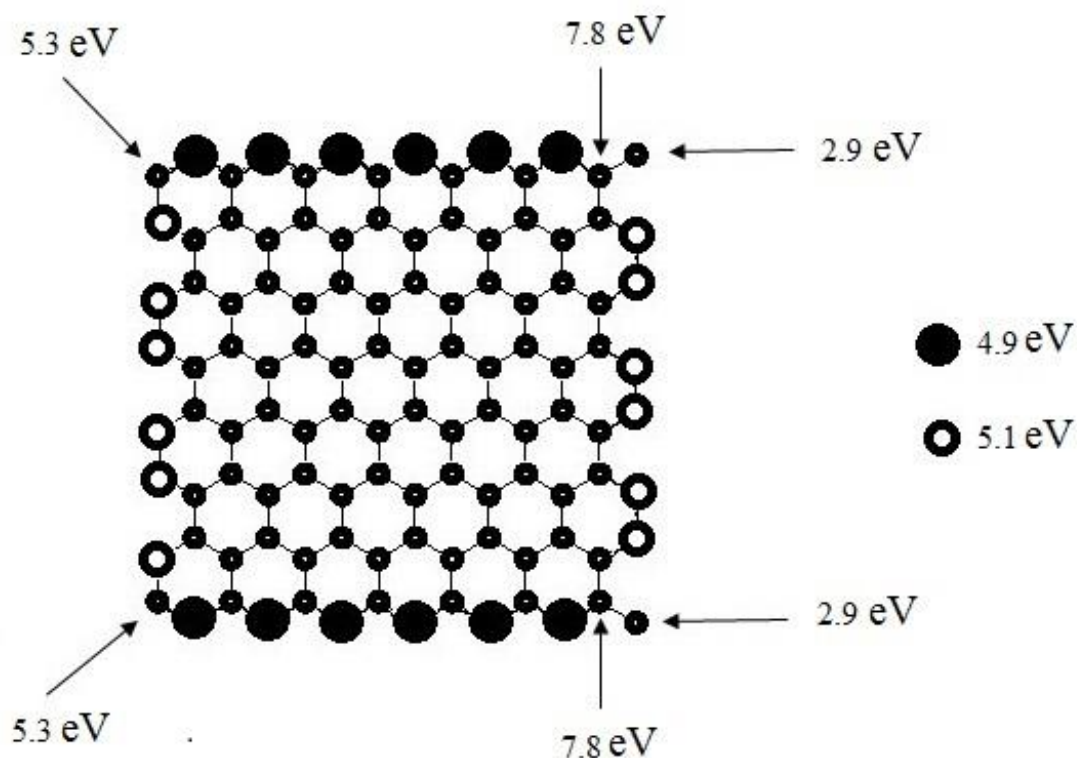


Рис. 1 Прямоугольный 112-атомный нанографен

Для изучения адсорбции фуллерена на краях графена использовались компьютерные модели фуллерена C_{60} и нанографена. Было рассмотрено три варианта адсорбции фуллерена на края нанографена (см. рисунок 2.):

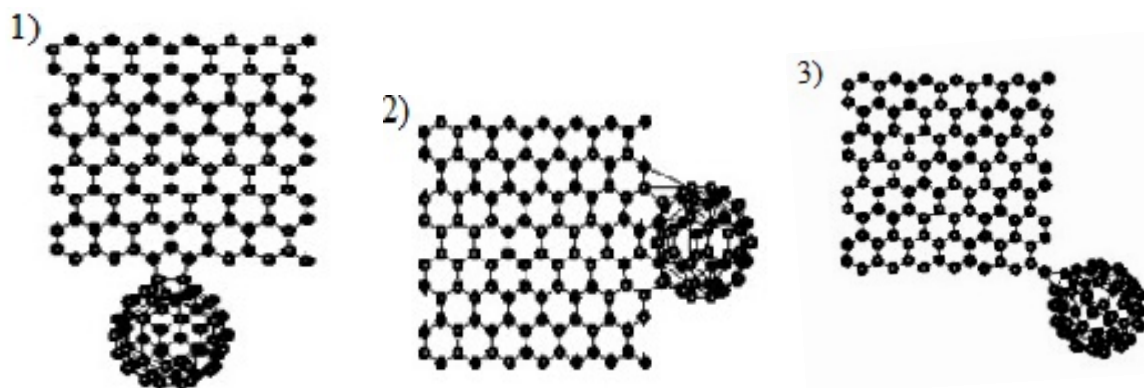


Рис. 2. Визуальные представления взаимодействия адсорбированного фуллерена C_{60} . 1) на середине zigzag края нанографена, 2) на середине armchair края и 3) на крайнем «угловом» атоме нанографена.

1) фуллерен адсорбирован на середине zigzag края нанографена,

2) фуллерен адсорбирован на середине armchair края нанографена

3) фуллерен адсорбирован около «углового» атома нанографена, у которого была энергия когезии 2.9 эВ.

Во всех этих трех вариантах адсорбции изначально задавалось, что геометрический центр фуллерена находится в плоскости, в которой расположен нанографен. После задания соответствующего первоначального взаимного расположения бездефектных фуллерена и нанографена методом минимизации энергии были найдены энергии связывания адсорбированного фуллерена с нанографеном и другие результаты, представленные в таблице 1

Таблица 1.

Характеристики фуллерена C₆₀, адсорбированного на краях графена

Номер варианта адсорбции на край графена	1	2	3
Энергия связывания, эВ	2.0	2.6	0.4
Радиус фуллерена усредненный, Å	3.60	3.61	3.60
Радиус фуллерена максимальный, Å	3.96	4.03	3.84
Радиус фуллерена минимальный, Å	3.52	3.24	3.52
Отношение максимального радиуса к минимальному радиусу	1.125	1.244	1.091

Из таблицы 1 следует, что лучше всего фуллерен адсорбируется на armchair крае нанографена, хуже всего на «угловом» атоме нанографена, энергия связывания при адсорбции на край нанографена может быть почти в два раза больше, чем наибольшая энергия связывания при адсорбции на поверхность графена, при этом наблюдается более сильное деформирование формы фуллерена.

1. D.W. Brenner, O.A. Shenderova, J.A. Harrison, S.J. Stuart, B. Ni, S.B. Sinnott, J. Phys: Condens. Matter. 14, 783 (2002).