МОДЕЛИРОВАНИE СТРУКТУРЫ С20 @ ЛИНЕЙНЫЙ КЛАСТЕР Cn @ГРАФЕНОВЫЙ ЛИСТ

Ш.Й. Аминов1) А.С. Косимов1)  И.Д. Ядгаров2\*)

1)Термезский государственный университет, Термез, Узбекистан

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

\*)e-mail: ishmuminyadgarov@gmail.com

В настоящей работе основной процесс компьютерного моделирования углеродных структур проходил в 3 этапа с использованием метода минимизации энергии [1]. На  первом этапе моделирования были построены компьютерные модели невзаимодействующих углеродных структур: линейных кластеров C*n* (1< *n* ≤ 5), бездефектного фуллерена C20, который имеет 20 атомов углерода и  идеального графена. В  модели бездефектного фуллерена все атомы находятся на  расстоянии *R* = 2.9  Å от  центра фуллерена, который считаем радиусом бездефектного невзаимодействующего фуллерена. Компьютерная модель идеального графена определялась посредством прямоугольного 600-атомного с наложением периодических условий на граничные атомы

В данной работе выполнено теоретическое исследование свойств стабильных углеродных структур «фуллерен + C*n*+ графен», где C*n*  — малый линейный кластер, играющий роль «мостика» между фуллереном и  графеном. В  процессе моделирования отдельно учитывалось влияние нековалентного взаимодействия фуллерена с  графеном на  стабильность, которое оказалось незначительным в  случае соединения фуллерена С20 и графена с помощью кластеров, так как благодаря этим кластерам фуллерен отстоит от графена на расстояниях больших, чем  равновесное расстояние нековалентного взаимодействия фуллерена с  графеном.

ЛИТЕРАТУРА

1. I. D.  Yadgarov, V. G.  Stel’makh, A. M.  Rasulov,
A. A. Dzhurakhalov. Tech. Phys. 2015, 60, №3, 474.