МОДЕЛИРОВАНИЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ УГЛЕРОДНЫХ ЦИКЛИЧЕСКИХ КЛАСТЕРОВ С НАНОГРАФЕНОМ

А.М.РАСУЛОВ, Ж.СУЮМОВ, Ж.ДЖУРАХАЛОВ, В.Г.СТЕЛЬМАХ Г., А.Х.РАСУЛОВ, И.Д.ЯДГАРОВ

Монте-Карло усули ёрдамида нанографен ҳамда С7, С12 ва С13 кластерлари қурилди. Нанографеннинг ушбу кластерлар билан ўзаро таъсири моделлаштирилди. Нанографен ва кластерларнинг ўзаро таъсири натижасида нанографен ва кластерлар хусусиятларининг ўзгариши аниқланди.

***Таянч сўзлар**: компьютерда моделлаштириш, нанографен, кластер, боғланиш энергияси, кластерлар ўзаро таъсири, нуқсон.*

Методом Монте-Карло были построены нанографен и круговые кластеры С7, С12 и С13. Смоделировано взаимодействие этих кластеров с нанографеном, в результате чего изменяются как свойства кластеров, так и свойства нанографена.

***Ключевые слова:** компьютерное моделирование, нанографен, кластер, энергии когезии, взаимодействие кластеров, дефект.*

The author of the article could manage to build the nanographene and circular clusters C&, C12 and C13. He modeled the interaction of these clusters with nanographene as a result of which peculiarities of both nanographene and clusters have changed.

***Key words:** computer simulation, nanographene, cluster, cohesive energy, introduction clusters. Defect.*

Идеальный графен представляет собой двумерную гексагональную кристаллическую решётку, состоящую из атомов углерода. Обычно в теоретических расчётах графен считают состоящим из большого или бесконечного количества атомов. В нашей работе рассматривался графен прямоугольной формы, состоящий из 272 атомов. Этот конечных размеров графен в дальнейшем будем называть нанографеном. Идеальная структура графена может нарушаться разными причинами, например, вакансиями атомов, замещением атомов углерода другими атомами, в частности, атомами азота, кремния как было рассмотрено в работе [1]. В нашей работе было рассмотрено изменение структуры нанографена в результате его взаимодействия с круговыми углеродными кластерами C_7, C_{12} и C_{13}.

Компьютерным моделированием на основе метода Монте-Карло были построены нанографен и круговые кластеры C_7, C_{12} и C_{13}. Затем моделировалось взаимодействие этих кластеров с нанографеном. Для описания межатомного взаимодействия использовался потенциал Бреннера второго поколения (REBO), который хорошо описывает углеродные структуры [2]. Этот потенциал имеет вид суммы по всем связям:

$$E_b = \sum_i \sum_{j(>i)} \left[V^R(r_{ij}) - b_{ij} V^A(r_{ij}) \right] \qquad (1)$$

где E_b - средняя энергия связи в электрон-вольтах (eV), r_{ij} - расстояние между атомами i и j. Функции $V^R(r_{ij})$ и $V^A(r_{ij})$ являются парно-аддитивными взаимодействиями, представляющими все межатомные отталкивания (между ионными остовами и т.д.) и притяжения между валентными электронами соответственно. Эти функции задаются следующим образом:

$$V^R(r) = f^C(r)(1 + Q/r)A \cdot \exp(-\alpha \cdot r) \qquad (2)$$

$$V^A(r) = f^C(r) \sum_{n=1,3} B_n \cdot \exp(-\beta_n \cdot r) \qquad 3)$$

где функция обрезания $f^C(r)$ имеет вид:

$$f^C(r)=\begin{cases}1 & r<D_{ij}^{\min}\\ \left\{1+\cos\left[\dfrac{(r-D_{ij}^{\min})}{(D_{ij}^{\max}-D_{ij}^{\min})}\right]\right\}/2 & D_{ij}^{\min}<r<D_{ij}^{\max},\\ 0 & r>D_{ij}^{\min}\end{cases} \qquad (4)$$

а величины A, Q, α, B_n и β_n $(1\le n\le 3)$ - это параметры для связей между двумя атомами углерода. Здесь n тип химической связи (т.е. одинарная, двойная или тройная связи).

Эмпирическая функция кратности связи, отражающая тип связи между атомами i и j, записывается как

$$b_{ij}=\frac{1}{2}\left[b_{ij}^{\sigma-\pi}-b_{ji}^{\sigma-\pi}\right]+b_{ij}^{\pi} \qquad (5)$$

где функции $b_{ij}^{\sigma-\pi}$ и $b_{ij}^{\sigma-\pi}$ зависят от места положения и углов связи, определяемых взаиморасположением каждого атома (*i*-го и *j*-го, соответственно) и регулируется гибридизацией орбиталей вокруг атомов. В нашей работе рассматриваются почти плоскостные структуры, поэтому согласно [3]

$$b_{ij}^{\sigma-\pi}=\left\{1+\sum_{k(\neq i,j)}f_{ij}^C(r_{ij})G\left[\cos(\theta_{ijk})\right]\right\}^{-1/2} \qquad (6)$$

Здесь угловая функция $G\left[\cos(\theta_{ijk})\right]$ модулирует распределение всех наиближайших соседей и определяет косинус угла связи между атомами *i – j – k*. Эта функция была получена в [2].

Для углов $0^\circ\le\theta\le 109.47^\circ$ вместо вышеупомянутой угловой функции использовалось другое выражение, которое даёт более точные результаты:

$$g_C=G_C(\cos(\theta))+Q(N_i^C)\{\gamma_C[\cos(\theta)]-G_C[\cos(\theta)]\} \qquad (7)$$

в котором

$$Q(N_i^C)=\begin{cases}1 & N_i^C<3.2\\ \left\{1+\cos\left[2\pi(N_i^C-3.2)\right]/2\right\} & 3.2<N_i^C<3.7\\ 0 & N_i^C>3.7\end{cases} \qquad (8)$$

где N_i^C число соседей атома углерода *i*. О функции $\gamma_C[\cos(\theta)]$ подробнее говорится в статье [4]. Функция $b_{ij}^{\sigma-\pi}$описана в [2], где также приведены величины для всех параметров, используемых в наших расчётах.

При взаимодействии кругового углеродного кластера C_7 с нанографеном расположение атомов кластера и нанографена менялись сравнительно незначительно, тогда как при взаимодействии кластеров C_{12} и C_{13} с нанографеном (см. рис. 1) это расположение атомов менялось сильнее. На рис. 1 видно, что кластер C_{12} стал сплюснутым, а кластер C_{13} принял почти треугольную форму. Следует отметить, что в результате взаимодействия с круговыми кластерами атомы нанографена стали располагаться не на одной плоскости (см. рис. 2).

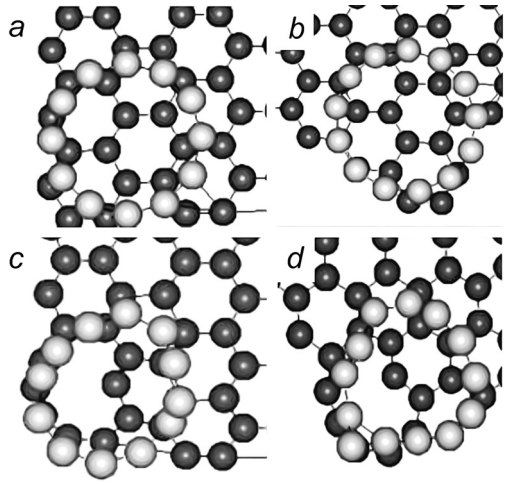

Рис. 1. **Вид сверху расположения атомов кластеров C_{12} и C_{13} (атомы показаны более светлыми кружками) и нанографена до взаимодействия: *a* – для кластера C_{12}, *b* – для кластера C_{13}; и после взаимодействия: *c* – для кластера C_{12}, *d* – для кластера C_{13}.**

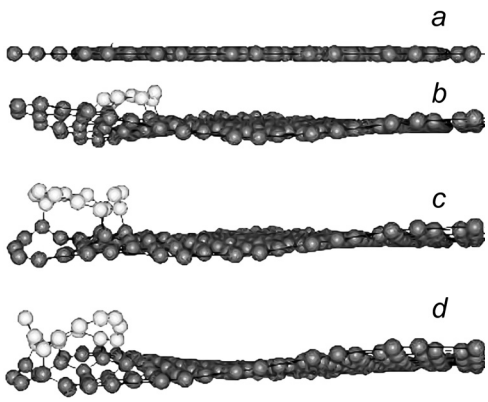

Рис. 2. **Вид сбоку расположения атомов нанографена: *a* – до взаимодействия с кластерами, *b* – после взаимодействия с кластером C_7, *c* – после взаимодействия с кластером C_{12}, *d* – после взаимодействия с кластером C_{13}. Атомы кластеров C_7, C_{12} и C_{13} показаны более светлыми кружками.**

Взаимодействие кластеров с нанографеном меняет как свойства кластеров, так и свойства нанографена. При этом меняется не только форма кластеров, но и форма нанографена. Следует отметить, что вакансии и атомы замещения (см. [1]) в графене не способствуют выходу атомов графена из общей плоскости графена, хотя возможно нарушение гексагональных ячеек графена. В случае взаимодействия нанографена с кластерами C_{12} и C_{13} наблюдалось разрушение одной гексагональной ячейки нанографена.

Для атомов круговых кластеров C_7, C_{12} и C_{13} энергии когезии E_h, которые обычно определяют в электрон-вольтах (эВ), равны для всех атомов в одном кластере до взаимодействия с нанографеном; E_h=5.50, 5.90 и 5.93 эВ соответсвтенно для атомов кластеров C_7, C_{12} и C_{13}. После взаимодействия некоторые атомы имеют большую или меньшую энергию, чем было. Так максимальные энергии когезии атомов кластеров C_7, C_{12} и C_{13} после взаимодействия равны соответственно E_{hmax}=6.58, 7.44 и 7.57 эВ, а минимальные - E_{hmin}=4.97, 5.26 и 2.92 эВ. Атомы нанографена до взаимодействия в основном имеют E_h=7.39 эВ и лишь 48 атомов, находящихся на самом краю нанографена, имеют E_h=5.10 эВ. После взаимодействия с круговым кластером C_7 (или, соответственно, с C_{12} и C_{13}) максимальная энергия

когезии одного из атомов нанографена становится 7.65 эВ (или, соответственно, 7.65 эВ и 7.56 эВ), а минимальная энергия принимает значение 4.93 эВ (или, соответственно, 4.85 эВ и 4.33 эВ).

Таким образом, взаимодействие с кластерами может привести к существенному дефектообразованию самого нанографена и изменению формы и средних энергий когезии как этих кластеров, так и нанографена.

Литература:

1. W. Zhou, M. D. Kapetanakis, M. P. Prange, S. T. Pantelides,S. J. Pennycook, J-C. Idrobo, Phys.Rev. Lett. 109, 206803 (2012).

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

Андижон давлат университети,
ТАТУ Фарғона филиали
Антверпен университети (Бельгия)
ЎзФА Ион-плазма ва лазер технологиялари институти
(Тақризчи: проф. С.З.Зайнобидинов)