



ДЕФЕКТООБРАЗОВАНИЕ В НАНОГРАФЕНЕ В РЕЗУЛЬТАТЕ РАССЕЙАНИЯ ИМ АТОМОВ УГЛЕРОДА

М.Б. Чориева
А.Н. Улукмурадов
И.Д. Ядгаров

Институт ионно-плазменных и лазерных технологий АН РУз, г.
Ташкент, Узбекистан, ishmuminyadgarov@gmail.com
Ташкентский институт текстильной и лёгкой промышленности г.
Ташкент, Узбекистан,
<https://doi.org/10.5281/zenodo.8413218>

ARTICLE INFO

Qabul qilindi: 25-September 2023 yil
Ma'qullandi: 28-September 2023 yil
Nashr qilindi: 30-September 2023 yil

KEY WORDS

компьютерное моделирование,
нанографен, дефект

ABSTRACT

Методом молекулярной динамики с использованием потенциала Бреннера было рассмотрено дефектообразование в результате рассеяния атомов углерода нанографеном. Получено, что характер дефектов в нанографене зависит от энергии и угла падения налетающего атома углерода.

Нанографен представляет собой двумерную гексагональную углеродную кристаллическую решётку (рис. 1) ограниченного размера. В нашей работе рассматривается дефектообразование в нанографене прямоугольной формы, состоящем из 112 атомов углерода, при рассеивании атомов углерода этим нанографеном. Компьютерным моделированием с использованием молекулярной динамики изучались процессы столкновения атомов углерода с кинетической энергией 10 и 100 эВ с нанографеном в точках А, В и С, находящихся в середине нанографена. Точка А – это один из внутренних атомов нанографена, точка В – точная середина между двумя ближайшими атомами, точка С – геометрическая середина гексагоналя (см. рис. 1). Угол падения, отсчитываемый от плоскости нанографена, задавался в пределах от 10° до 90° с шагом в 10° . Для описания межатомного взаимодействия использовался потенциал Бреннера второго поколения (REBO), который хорошо описывает углеродные структуры [1].

Результаты взаимодействия налетающего атома углерода с нанографеном собраны в таблицу 1. В этой таблице рассмотренные нами столкновения атома углерода показывают следующие явления: а) осаждение или внедрение налетающего атома в нанографен (отмечается как «Ос»), б) только отскакивание налетающего атома от нанографена (помечается как «От»), в) замещение атома нанографена налетающим атомом, при этом замещаемый атом нанографена распыляется (помечается как «Зм»), г) прохождение налетающего атома через нанографен без его разрушения (помечается как «Пр1»), д) прохождение налетающего атома через нанографен с его разрушением

(помечается как «Пр2»), е) отскакивание налетающего атома углерода с выбиванием одного или нескольких атомов нанографена (помечается как ОВ). Случаи д) и е) соответствуют образованию дефектов – вакансии атомов в нанографене.

В результате рассеяния атома углерода нанографеном менялась средняя энергия когезии нанографена, что показано в таблице 2, и некоторые из рассеянных атомов химически связывались с нанографеном, образуя дефект – примесный атом, что показано в таблице 3.

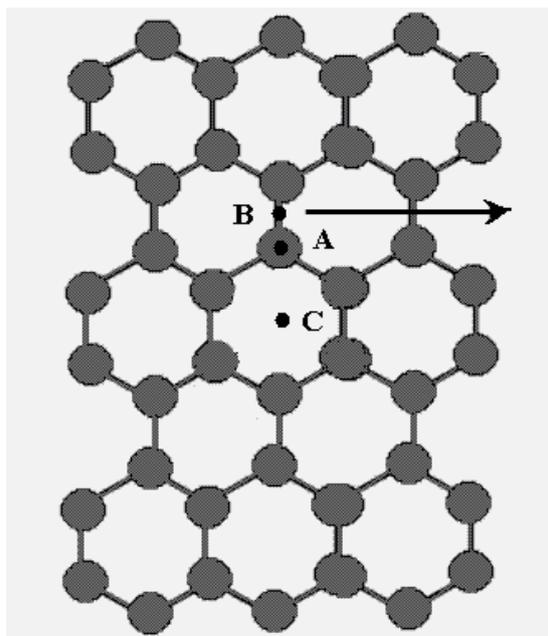


Рис. 1 Участок нанографена. Стрелкой показано направление проекции на плоскость графена скорости падающего атома углерода.

Таблица 1 Результаты взаимодействия налетающего атома углерода с нанографеном, серым цветом помечены случаи образования дефектов – вакансии атомов.

Кинетическая энергия, эВ	Точка падения	Угол падения налетающего атома, градус								
		10	20	30	40	50	60	70	80	90
10	A	Ос	Ос	От	Ос	Ос	Ос	Ос	От	От
	B	От	От	От	Ос	Ос	Ос	Ос	Ос	Ос
	C	Ос	От	От	Ос	Ос	Ос	Ос	Ос	От
100	A	От	От	ОВ	Зм	Зм	Зм	Зм	Зм	Зм
	B	От	От	От	Пр2	Пр2	Пр2	Пр2	Пр2	Пр2
	C	От	От	От	ОВ	Пр2	Пр1	Пр1	Пр1	Пр1

Таблица 2 Средняя энергия когезии нанографена в электрон-вольтах после рассеяния им атома углерода.

Кинетическая энергия, эВ	Точка падения	Угол падения налетающего атома, градус								
		10	20	30	40	50	60	70	80	90
10	A	6.65	6.65	6.67	6.64	6.64	6.65	6.65	6.64	6.64
	B	6.68	6.69	6.64	6.65	6.64	6.67	6.66	6.65	6.65
	C	6.69	6.65	6.65	6.62	6.61	6.66	6.63	6.66	6.63
100	A	6.65	6.56	6.48	6.48	6.60	6.64	6.65	6.67	6.67
	B	6.66	6.61	5.94	5.80	6.26	6.22	6.16	6.31	6.30
	C	6.65	6.58	6.49	5.64	6.00	6.53	6.55	6.60	6.62

Таблица 3 Энергия когезии рассеиваемого атома углерода в электрон-вольтах, «--» - означает что рассеиваемый атом химически не связался с нанографеном. Серым цветом помечены случаи образования дефектов – вакансии атомов.

Кинетическая энергия, эВ	Точка падения	Угол падения налетающего атома, градус								
		10	20	30	40	50	60	70	80	90
10	A	2.36	2.32	--	4.58	3.46	2.23	2.33	--	--
	B	--	--	--	2.33	5.02	4.72	4.63	4.68	4.68
	C	3.00	--	--	5.10	4.75	4.69	4.63	4.17	--
100	A	--	--	--	6.81	7.34	7.24	7.29	7.40	7.40
	B	--	--	--	--	--	--	--	--	--
	C	--	--	--	--	--	--	--	--	--

В результате рассеяния атома углерода нанографеном менялась средняя энергия когезии нанографена. Получено, что характер дефектов в нанографене зависит от энергии и угла падения налетающего атома углерода.

References:

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