

Дефекты в графене в результате рассеяния им атомов углерода с энергиями 10 и 100 eV

© И.Д. Ядгаров,¹ В.Г. Стельмах,¹ А.М. Расулов,¹ А.А. Джурахалов²

¹ Институт ионно-плазменных и лазерных технологий АН Р Узбекистан, 100125 Ташкент, Узбекистан

² Dept. of Mathematics and Computer Sciences, University of Antwerp, Antwerp, Belgium
e-mail: iyadgarov@mail.ru

(Поступило в Редакцию 5 сентября 2014 г.)

Методом молекулярной динамики исследованы процессы дефектообразования в результате рассеяния графеном атомов углерода с энергиями 10 и 100 eV при разных углах падения. Возможность образования адатома углерода при энергиях 10 eV рассеиваемого атома углерода и вакансий в графене при энергиях 100 eV рассеиваемого атома углерода при этом зависит от угла и точки падения налетающего атома углерода.

Введение

Графен как объект исследования является уникальным в ряду других [1]. Одним из важных вопросов является влияние вакансий и дефектов на свойства графена [2–4]. Кроме того, представляет интерес вопрос каким образом, в результате какого процесса может образоваться тот или иной дефект. В работе [5] этот вопрос рассматривался на основе эксперимента ионного соударения с графеном (Ar^+ -graphene), а в [6] с использованием компьютерного моделирования изучалось воздействие бомбардировки атомов углерода на графен при нормальном падении.

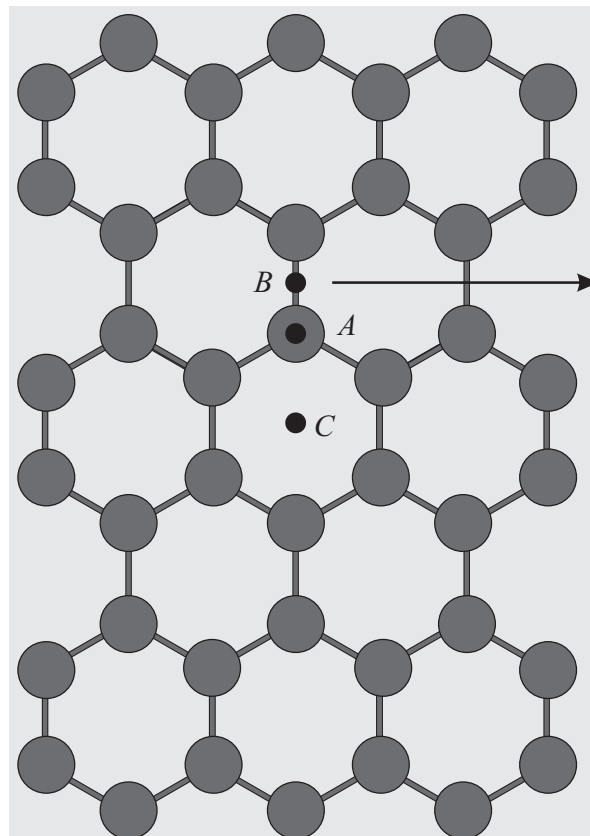
Цель настоящей работы — методом молекулярной динамики исследовать характер дефектов в графене, возникающих в результате рассеяния им низкоэнергетических атомов углерода с учетом угла падения.

Компьютерная модель

Графен представляет собой двумерную гексагональную углеродную кристаллическую решетку. Модель графена прямоугольной формы, состоящая из 112 атомов углерода, строилась с наложением периодических условий на граничные атомы вдоль плоскости этой структуры. Затем модель графена прошла процесс демпирования (введения сил взаимодействия при $T = 0 \text{ K}$) и процесс термализации демпированной структуры, в результате чего модель графена „разогрели“ до 300 K. Для описания межатомного взаимодействия использовался потенциал Бреннера второго поколения (REBO), который хорошо описывает углеродные структуры [7].

После того как была получена компьютерная модель графена, разогретого до 300 K, изучались процессы столкновения атомов углерода с кинетической энергией 10 и 100 eV с этим графеном в точках *A*, *B* и *C* с использованием молекулярной динамики. Точка *A* —

это один из атомов графена, точка *B* — точная середина между двумя ближайшими атомами графена, точка *C* — геометрическая середина гексагональной ячейки (рисунок). Угол падения, отсчитываемый от плоскости графена, задавался в пределах от 10 до 90° с шагом в 10° и для описания межатомного взаимодействия по-прежнему использовался потенциал Бреннера.



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

Таблица 1. Результаты взаимодействия налетающего атома углерода с графеном, полужирным помечены случаи образования дефектов — вакансии атомов

Кинетическая энергия, eV	Точка падения	Угол падения налетающего атома, grad								
		10	20	30	40	50	60	70	80	90
10	<i>A</i>	<i>Ad1</i>	<i>Ad1</i>	<i>Sc</i>	<i>Ad3</i>	<i>Ad1</i>	<i>Ad2</i>	<i>Sc</i>	<i>Sc</i>	<i>Sc</i>
	<i>B</i>	<i>Sc</i>	<i>Ad2</i>	<i>Sc</i>	<i>Ad1</i>	<u><i>Ad2</i></u>	<u><i>Ad3</i></u>	<u><i>Ad2</i></u>	<u><i>Ad2</i></u>	<u><i>Ad2</i></u>
	<i>C</i>	<i>Ad2</i>	<i>Ad2</i>	<i>Sc</i>	<i>Ad3</i>	<u><i>Ad3</i></u>	<i>Sc</i>	<i>Ad3</i>	<i>Ad2</i>	<i>Sc</i>
100	<i>A</i>	<i>Sc</i>	<i>Sc</i>	<i>Sp(1)</i>	<i>Rp</i>	<i>Rp</i>	<i>Dm</i>	<i>Rp</i>	<i>Rp</i>	<i>Rp</i>
	<i>B</i>	<i>Sc</i>	<i>Sc</i>	<u><i>Sc</i></u>	<i>Sc(2)</i>	<i>Sp(2)</i>	<i>Sp(2)</i>	<i>Sp2</i>	<i>Sp(2)</i>	<i>Sp(2)</i>
	<i>C</i>	<i>Sc</i>	<i>Sc</i>	<i>Sc</i>	<i>Sc</i>	<i>Sc*</i>	<i>Dm</i>	<i>Sc*</i>	<i>Sc*</i>	<i>Sc</i>

Таблица 2. Энергия когезии рассеиваемого атома углерода в электрон-вольтах

Кинетическая энергия, eV	Точка падения	Угол падения налетающего атома, grad								
		10	20	30	40	50	60	70	80	90
10	<i>A</i>	2.39	2.34	—	4.69	2.23	2.37	—	—	—
	<i>B</i>	—	2.31	—	2.31	4.07	4.65	4.50	4.69	4.71
	<i>C</i>	2.29	2.35	—	4.53	4.71	—	4.61	4.69	—
100	<i>A</i>	—	—	—	7.19	7.24	7.09	6.94	7.29	7.02
	<i>B</i>	—	—	—	—	—	—	—	—	—
	<i>C</i>	—	—	—	—	—	3.78	—	—	—

Примечание. „—“ — означает, что рассеиваемый атом химически не связался с графеном.

Таблица 3. Наименьшая энергия когезии атома графена после воздействия с падающим атомом углерода

Кинетическая энергия, eV	Точка падения	Угол падения налетающего атома, grad								
		10	20	30	40	50	60	70	80	90
10	<i>A</i>	6.89	6.97	—	5.97	6.91	6.85	—	—	—
	<i>B</i>	—	<u>6.61</u>	—	6.97	<u>7.00</u>	6.04	<u>6.99</u>	<u>7.08</u>	<u>7.06</u>
	<i>C</i>	<u>7.06</u>	<u>6.68</u>	—	<u>5.93</u>	<u>6.11</u>	—	<u>6.57</u>	7.04	<u>6.88</u>
100	<i>A</i>	—	—	4.87	6.81	3.40	2.34	6.73	4.67	—
	<i>B</i>	—	—	6.87	4.76	6.09	4.84	4.77	4.86	4.93
	<i>C</i>	—	—	—	—	3.09	2.71	2.83	2.48	6.85

Примечание. Подчеркнутое число — означает, что 2 атома графена имеют такую энергию, „—“ — означает, что изменений энергий когезий атомов графена, больших чем 0.4 eV, не произошло.

Таблица 4. Количество атомов графена, энергия когезии которых уменьшилась или увеличилась более чем на 0.4 eV в результате взаимодействия с графеном

Кинетическая энергия, eV	Точка падения	Угол падения налетающего атома, grad								
		10	20	30	40	50	60	70	80	90
10	<i>A</i>	3	3	—	6	3	4	—	—	—
	<i>B</i>	—	3	—	3	2	5	2	—	—
	<i>C</i>	—	2	—	4	5	—	4	—	4
100	<i>A</i>	—	—	3	4	11	6	15	7	—
	<i>B</i>	—	—	8	18	15	6	4	8	6
	<i>C</i>	—	—	—	—	35	33	36	29	9

Примечание. „—“ — означает, что таких изменений энергий когезий атомов графена не произошло.

Результаты расчета

Результаты взаимодействия налетающего атома углерода с графеном собраны в табл. 1, где рассмотренные нами столкновения показывают следующие явления:

1) осаждение и образование адатома (помечается как „Ad1“, „Ad2“ и „Ad3“, если адатом находится вблизи точек, аналогичным точкам *A*, *B* и *C* соответственно, при этом подчеркнутые „Ad2“ и „Ad3“ означают, что атомы графена, взаимодействующие с адатомом, вытолкнуты в противоположную от адатома сторону графена);

2) только отскакивание налетающего атома от графена (помечается как „Sc“);

3) замещение атома графена налетающим атомом, при этом замещаемый атом графена распыляется (помечается как „Rp“, если распыляемый атом движется почти по направлению падавшего атома, и как „Rp“, если распыляемый атом движется почти навстречу падавшего атома);

4) прохождение налетающего атома через графен без его распыления (помечается как „Sc“ или как „Sc*“, если образовались дефекты в графене);

5) прохождение налетающего атома через графен с его распылением (помечается как „Sp(*n*)“, где *n* — количество распыленных атомов графена);

6) отскакивание налетающего атома углерода с выбиванием одного или нескольких атомов графена (помечается как *Sc*(*n*), где *n* — количество распыленных атомов графена);

7) сложные изменения структуры графена (помечается как „Dm“).

Атомы углерода, захваченные графеном при их взаимодействии, имеют разные энергии когезии, численные значения которых приведены в табл. 2.

Нарушение структуры графена приводит к тому, что часть атомов графена меняют свои связи с другими атомами, при этом появляются атомы, имеющие наименьшую энергию когезии, чем другие атомы графена (табл. 3), и появляется группа атомов, энергии когезии которых изменились от первоначального значения (табл. 4).

Заключение

Методом молекулярной динамики исследовано, каким образом может образоваться адатом углерода на графене в определенных положениях: над атомом графена, между двумя атомами графена или в центре гексагона графена. Получено также, что возможно прохождение атома углерода через графен без его разрушения или с нарушением его структуры и образованием вакансий атомов.

Список литературы

- [1] Geim A.K., Novoselov K.S. // Nature Mater. 2007. Vol. 6. P. 183.
- [2] Loktev V.M. // Fizika Nizkikh Temperatur. 2012. Vol. 38. N 8. P. 993–1000.
- [3] Алисултанов 3.3. // ФТТ. 2013. Т. 55. Вып. 6. С. 1211–1220.
- [4] Nanda B.R.K., Sherafati M., Popovic Z.S., Satpathy S. // New J. Phys. 2012. P. 083 004.
- [5] Tapasztly L., Dobrik G., Nemes-Incze P., Vertesy G., Lambin Ph., Biry L.P. // Phys. Rev. Lett. 2008. Vol. 78. C. 233–407.
- [6] Bellido E.P., Seminario J.M. // J. Phys. Chem. C. 2012. Vol. 116. C. 4044–4049.
- [7] Brenner D.W., Shenderova O.A., Harrison J.A., Stuart S.J., Ni B., Sinnott S.B. // J. Phys.: Condens. Matter. 2002. Vol. 14. C. 783–802.