

# КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ РАДИАЦИОННЫХ ДЕФЕКТОВ В УГЛЕРОДНОЙ НАНОСТРУКТУРЕ ГРАФЕНА

А.М.Ильин, Р.Р.Немкаева, М.У.Оспанова, М.И.Ким, О.Г.Докучаева  
*Казахский национальный университет им. аль-Фараби, Алматы*

В работе выполнено компьютерное моделирование и исследование энергетических характеристик радиационных дефектов в углеродной наноструктуре графена. Определена стабильная конфигурация трехмерного дефекта, возникающего при адсорбции выбитого атома углерода графеновой плоскостью. Проведен расчет релаксации структуры в зоне вакансии, оценено влияние релаксации на энергетику дефекта.

## **Введение**

Необычные механические и уникальные электронные свойства углеродных тубулярных наноматериалов делают их весьма перспективными для широкого спектра научных и технологических приложений [1,2]. Однако, уже хорошо известно, что все их свойства сильнейшим образом связаны со структурой [1-3]. Таким образом, при практическом использовании устойчивость наноструктуры будет играть решающую роль в обеспечении стабильности и надежности работы устройств или в сохранении уровня заданных характеристик материалов, использующих углеродные наноструктуры, например, композитов. Тенденции развития современной техники делают весьма вероятным использование углеродных наноструктур в условиях корпускулярного радиационного воздействия, например в космических исследованиях, в реакторной технике и т.д. [4,5]. Более того, в определенных условиях облучение может служить тонким инструментом для воздействия на наноструктуры и целенаправленного изменения их свойств [6]. Однако, прямые экспериментальные исследования радиационных эффектов в углеродных нанотубулярных структурах, по понятным причинам представляют собой чрезвычайно сложную задачу [7]. В связи с этим очень важную роль в радиационной физике наноструктур играют компьютерное моделирование и исследование радиационных эффектов [8,9]. В последнее время значительное внимание в этой области стало уделяться изучению свойств графена – индивидуальной плоскости или очень тонкой системы из нескольких плоскостей структуры графита. Получение графена и его экспериментальное исследование пока еще связано с методическими и техническими трудностями, тем не менее, высокие потенциальные возможности использования графена наряду с нанотрубками делают актуальными теоретические исследования его характеристик. Плоская структура графена интересна еще и тем, что именно для нее характерно «чистое» электронное состояние  $sp^2$ . Имея в виду возможное использование устройств, содержащих графеновые элементы, в условиях радиационного воздействия необходимо исследовать свойства радиационных дефектов, которые могут формироваться в такой структуре. До настоящего времени вопрос о том, какие именно конфигурации дефектов могут возникать и стабильно существовать в углеродных наноструктурах остается предметом лабораторных и компьютерных исследований.

В настоящей работе компьютерное моделирование использовалось для изучения динамики и энергетических характеристик трехмерного радиационного дефекта, представляющего атом углерода, адсорбированный плоскостью графена. Исследование проводилось с использованием метода молекулярной динамики и квантово-химических программ из пакета ChemOffice Ultra.

## Объекты моделирования и результаты расчетов

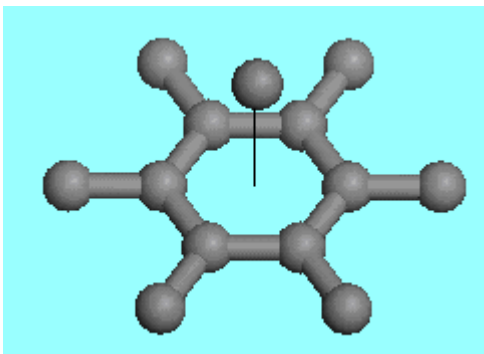


Рис.1. Радиационный дефект с конфигурацией «адсорбированный атом».

На рисунке 1 показана модельная конфигурация дефекта, представляющего собой выбитый атом углерода, адсорбированный плоскостью графена. Для того, чтобы определить вероятную стабильную конфигурацию дефекта необходимо найти положение выбитого атома, соответствующее минимуму энергии системы. Расчет проводился с использованием метода функционала плотности, работающего в структуре пакета ChemOffice Ultra . На рисунке 1 показан фрагмент, атомы которого принимались в расчет при вычислениях.

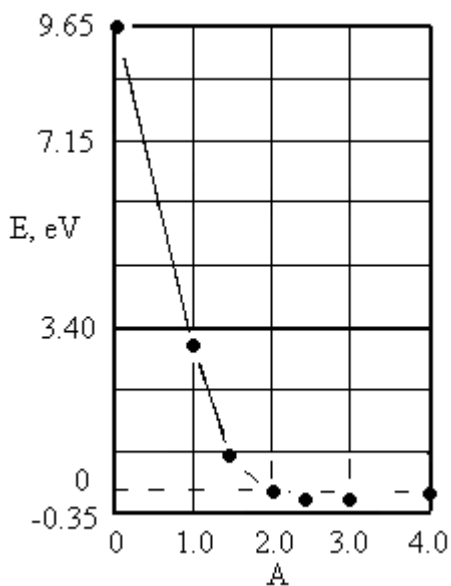


Рис.2. Зависимость энергии связи дефекта от расстояния внедренного атома от плоскости графена при его расположении над центром гексагона.

Из рисунка 2 видно, что для данного типа дефекта существует связанное состояние с отрицательной энергией. Максимальное значение энергии связи составляет - 0.18 эВ и соответствует расстоянию адсорбированного атома от плоскости  $Z = 2.5$  Å. Расчет показал, что энергия атома углерода при уменьшении расстояния до плоскости графена резко возрастает и

если атом внедрен в плоскость графена (в центре гексагона), то энергия дефекта достигает 9.65 эВ. Вариации положения атома вдоль плоскости графена показали, что небольшие боковые смещения атома от положения над центром гексагона только увеличивают энергию дефекта.

Это указывает на то, что конфигурации с расположением внедренного атома углерода в плоскости графена очень маловероятны и нестабильны. Таким образом, именно центральная конфигурация дефекта, представленная на рисунке 1 с расстоянием от плоскости графена  $Z = 2.5 \text{ \AA}$  является стабильной. Кроме того, полученный результат показывает, что для выбитых атомов углерода с энергиями меньше 9.65 эВ графен будет представлять непроницаемую плоскость.

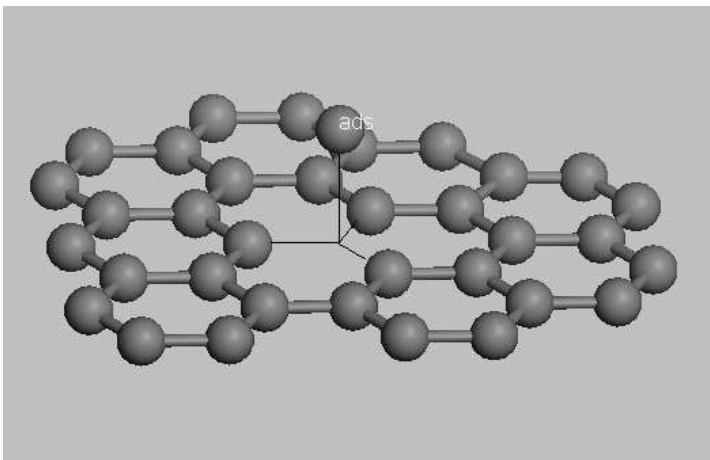


Рис.3. Изолированный радиационный дефект с конфигурацией «вакансия – выбитый адсорбированный атом» в графене. Адсорбированный атом отмечен как “ads”.

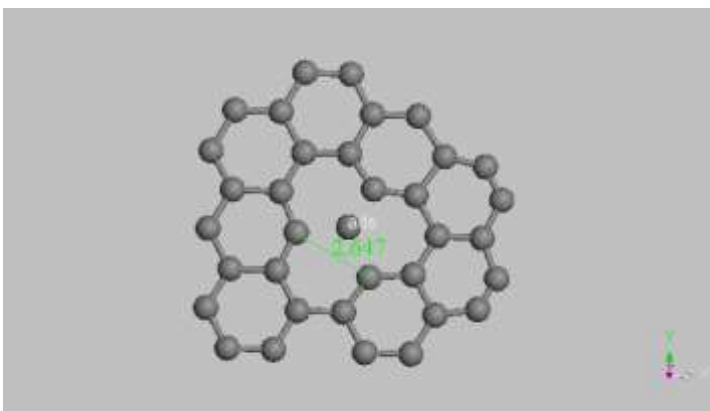


Рис.4. Структура зоны вакансии после релаксации

На рисунке 4 показана структура зоны вакансии после релаксации методом минимизации энергии. Отчетливо видно, что в результате релаксации структуры зоны вакансии заметно изменилась по сравнению с идеальным гексагоном. Зона вакансии явно увеличилась в размерах. Один из ключевых размеров гексагональной структуры графена, параметр  $d = \sqrt{3}a = 2.46 \text{ \AA}$  как видно из рисунка, после релаксации составляет  $2.647 \text{ \AA}$ , т.е. изменение параметра составило около 8%. Для сравнения отметим, что в трехмерных материалах, например, ГЦК металлах,

сдвиг соседних атомов в зоне вакансии происходит в обратном направлении – к центру вакансии и при этом он значительно меньше по величине: 1-2 %.

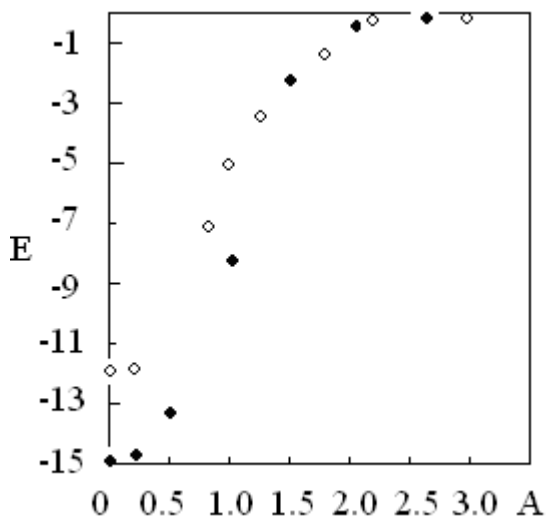


Рис.5. Изменение энергии адсорбированного атома над вакансией в исходном состоянии (темные значки) и после релаксации (светлые значки) в зависимости от расстояния атома до плоскости графена.

После получения релаксировавшей структуры проводился расчет энергии дефекта для различных положений атома  $C_{ads}$  над плоскостью. На рисунке 4 показана зависимость энергии дефекта от расстояния между атомом и плоскостью графена при расположении выбитого атома над центром вакансии. Там же для сравнения приведены результаты расчета энергии дефекта без релаксации. Видно, что релаксация зоны вакансии ведет к существенному возрастанию энергии что особенно сильно сказывается при малых расстояниях атома С от плоскости. При удалении атома от плоскости более чем на 1.5 А различия в энергии дефекта становятся несущественными.

Представленный результат свидетельствует о том, что данный тип дефекта нестабилен и при расчетах следует учитывать релаксацию зоны вакансии. Очевидно, что энергия конечного состояния будет в значительной мере определяться тем, успеет ли пройти релаксация структуры графена до того, как выбитый атом займет вакансию.

### Литература

1. Харрис П. Углеродные нанотрубы и родственные структуры. М., Техносфера, 2003.- 336с.
2. Пул Ч, Оуэнс Ф. Нанотехнологии. М., Техносфера, 2007.-374с.
3. Рит М. Наноконструирование в науке и технике. М-И, 2005- 160с
4. Новикова Л.С., Панасюк М.И. Новые наукоемкие технологии в технике. Воздействие космической среды на материалы и оборудование космических аппаратов.- М.:ЭНЦИТЕХ, 2000.-100 с.
5. Акишин А.И., Бондаренко Г., Быков Д.В. Физика воздействия концентрированных потоков энергии на материалы.- М.: Изд-во УНЦ ДО, 2003.- 418 с.

6. Fuller T. In-situ observation of the formation and stability of single fullerene molecules under electron irradiation // Chem.Phys.Lett.- 1996.-№ 254.- P. 55-59.
7. Неволин В. Зондовые технологии в электронике. М., Техносфера, 2006-160с
8. Ching-hwa Kiang. Electron irradiation induced dimensional change in carbon nanotubes // Carbon.- 2000.-№ 38.-С. 1699-1701.
9. Krashennnikov A.V. Formation of ion-irradiation-induced defects in carbon nanotubes // Phys.Rev. B.- 2001.- V.63.- P. 245-247.

### **КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ РАДИАЦИОННЫХ ДЕФЕКТОВ В УГЛЕРОДНОЙ НАНОСТРУКТУРЕ ГРАФЕНА**

**А.М.Ильин, Р.Р.Немкаева, М.У.Оспанова, М.И.Ким, О.Г.Докучаева**

Работа содержит результаты компьютерных экспериментов по моделированию и исследованиям радиационных дефектов в углеродной наноструктуре графена. Квантово-химическими методами проведены расчеты релаксации структуры в зоне вакансии, оценено влияние релаксации на энергетику дефекта. Найдена стабильная конфигурация и определена энергия связи трехмерного дефекта, возникающего при адсорбции выбитого атома углерода графеновой плоскостью.

### **COMPUTER SIMULATION OF RADIATION DEFECTS IN CARBON NANOSTRUCTURE OF GRAPHEN**

**A.M. Ilyin, R.R. Nemkaeva, M.U. Ospanova, M.I. Kim, O.G. Dokuchaeva**

This work contains results of computer experiments by simulation and investigation of radiation defects in carbon nanostructure of graphen. The calculations of structure relaxation in vacancy zone were carried out by quantum-chemical methods; the relaxation's influences on defect's energetic were estimated. Stable configuration of three- dimensional defect arising during adsorption of knocked atom by graphite plane was found. Bond energy of this defect was defined.

### **КОМІРТЕК НАНОСТРУКТУРАНЫҢ ДЕФЕКТЕЛЕРІН КОМПЬЮТЕРМЕН МОДЕЛЬДЕУ**

**А.М. Ильин, Р.Р. Немкаева, М.У.Оспанова, М.И. Ким, О.Г. Докучаева**

Берілген жұмыста графеннің көміртекті нанокұрылымындағы радиациялық ақауларды модельдеу және зерттеулердің компьютерлік нәтижелер келтірілген. Кванттық химиялық әдістердің көмегімен вакансия аймағындағы құрылымның релаксациясының есептеулері жүргізілген және релаксацияның ақау энергетикасына әсері бағаланған болатын. Графен жазықтығымен ұрылған көміртекті атомының адсорбциясы нәтижесінде пайда болған үш өлшемді ақаудың байланыс энергиясы анықталып, тұрақты конфигурациясы табылған болатын.