

Байгаринова Г.А.,  
Тоганбаева Л.К., Ильин А.М.

**Компьютерное  
моделирование композитных  
графеновых наноструктур**

В работе выполнено компьютерное моделирование, квантово-механические методы и МД исследования энергетических и структурных характеристик дефектов в углеродной наноструктуре графена. Представлены возможные компьютерные модели оксида графена и FLG и построены компьютерные модели взаимодействия цепочечных молекул полимера с наноструктурой графена. В процессе выполнения работы использовались программные средства ChemOffice (МД и квантово-механические методы). Результаты моделирования подтверждают, что графеновые структуры с дефектами могут быть использованы для существенного улучшения адгезии к полимерам по сравнению с идеальными структурами. Результаты исследований могут быть использованы для создания композитных материалов с улучшенными физико-механическими свойствами.

**Ключевые слова:** графен, компьютерное моделирование, углеродные наноструктуры, дефекты, оксид графена.

Baigarinova G.A.,  
Toganbaeva L.K., Ilyin A.M.

**Computer simulation  
of composite graphene  
nanostructures**

In the work performed computer simulations of quantum-mechanical methods and MD studies of the energy and structural characteristics of defects in carbon nanostructures of graphene. The work presents possible computer models of graphene oxide and FLG and built a computer model of interaction between the molecules of the polymer chain with a nanostructure of graphene. During the work was used ChemOffice software (MD and quantum mechanical methods). Simulation results confirm that the graphene structure with defects may be used to substantially improve adhesion to polymers compared to the ideal structures. Results of investigations can be used to create composite materials with improved physical and mechanical properties.

**Key words:** graphene, computer simulations, carbon nanostructures, defects, graphene oxide.

Байгаринова Г.А.,  
Тоганбаева Л.К., Ильин А.М.

**Композитті графенді  
наноқұрылымдарды  
компьютерлік моделдеу**

Жұмыста графеннің көміртекті наноқұрылымындағы дефектінің энергетикалық және құрылымдық сипаттамалары зерттелген, кванттық механика және молекулалық динамика әдістерімен компьютерлік моделдеу жүргізілген. Графен оксидінің және FLG құрылымының мүмкін болатын компьютерлік моделдері ұсынылған және графен наноқұрылымымен полимердің тізбектік молекулаларының өзара әсер етуінің компьютерлік моделдері көрсетілген. Жұмысты орындау барысында ChemOffice бағдарламалық қамтамасыз ету пайдаланған (МД және кванттық механика әдістері). Моделдеу нәтижелері идеал құрылымдармен салыстырғанда дефекттері бар графен құрылымдарын полимерлерге адгезияны айтарлықтай жақсарту үшін қолдануға болатындығын растайды. Зерттеу нәтижелерін физика-механикалық қасиеттері жақсартылған композиттік материалдарды жасап шығару үшін қолдануға болады.

**Түйін сөздер:** графен, компьютерлік моделдеу, көміртекті наноқұрылымдар, дефекттер, графен оксиді.

## **КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ КОМПОЗИТНЫХ ГРАФЕНОВЫХ НАНОСТРУКТУР**

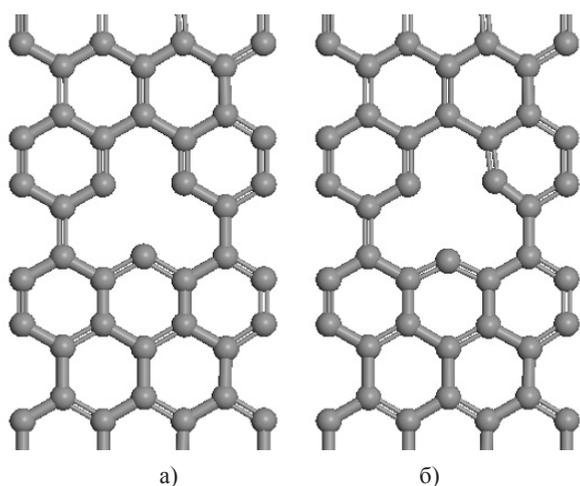
### **Введение**

В настоящее время большое внимание исследователей и инженеров привлекает перспектива создания композитных материалов на основе углеродных наноструктур, в частности, графена и его производных [1-3]. Определенные трудности на этом пути связаны с известной инертностью  $sp^2$  структуры идеального графена. В этой связи перспективным представляется использование графеновых структур, содержащих дефекты, которые могут улучшить адгезионные характеристики в матричном материале. В качестве таких материалов рассматриваются в частности, различные оксиды графена, FLG структуры [4-6]. Необходимо отметить, что зачастую разработка и изучение новых наноструктур и наноматериалов затруднены наноразмерами объектов, из-за чего для получения и прямого лабораторного исследования требуется применение приборов, не всегда доступных даже очень хорошо оснащенным лабораториям. В связи с этим, важную роль в нанофизике играет компьютерное моделирование исследуемых нанообъектов, сопровождаемое квантово-механическими расчетами их энергетических и структурных характеристик. В настоящей работе были построены компьютерные модели нескольких наносистем, которые на наш взгляд могут считаться типичными для создания композитных материалов на основе графеновых структур.

### **Компьютерное моделирование**

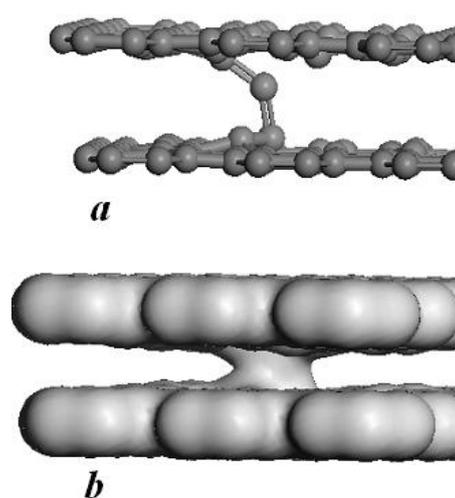
С целью получить максимально корректные финишные наноструктуры при моделировании и расчетах постоянно использовались процедуры оптимизации по энергии. Энергетические характеристики наноструктур вычислялись с точностью до 0.02 эВ. На рисунке 1 представлены фрагменты компьютерных моделей графеновых лент с простыми дефектами – одиночными вакансиями.

Отчетливо виден эффект оптимизации наноструктуры по энергии, обнаруживающий существенное изменение строения вакансионной зоны в графеновой ленте.



а) без оптимизации значение параметра решетки совпадает с известным для идеальной структуры значением 2.46 Å;  
б) после оптимизации 2.79 Å (вакансия расширяется)

**Рисунок 1** – Фрагменты компьютерных моделей графеновых полос с дефектами – одиночными вакансиями

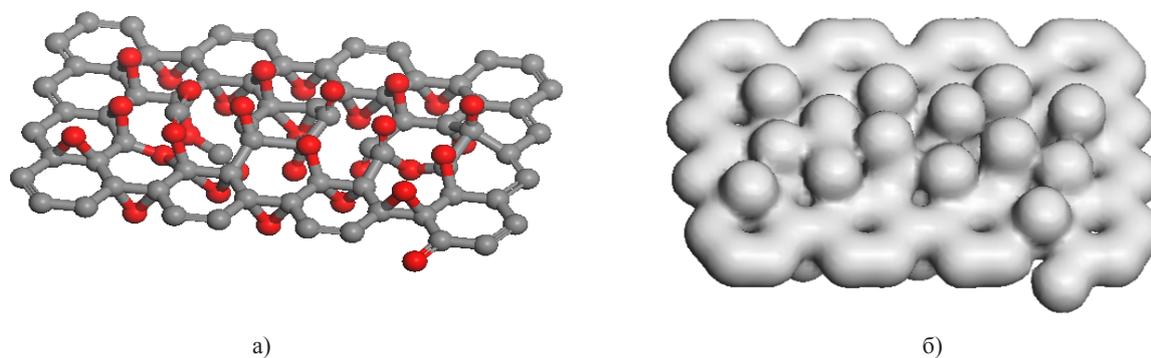


**Рисунок 2** – Фрагменты компьютерных моделей FLG -2 (двухслойные наноструктуры) с мостиковым дефектом

На рис.2. представлены компьютерные модели двухслойных наноструктур графена (FLG). Расчеты такого типа дефектов показывают энергию связи 4-5 эВ. Такие дефекты, соединяя графеновые слои прочными ковалентными мостиками, создают жесткие наносистемы которые могут быть перспективными для создания композитных материалов нового типа.

Большой интерес для формирования таких материалов представляют наносистемы из оксидов графена. Одна из возможных кон-

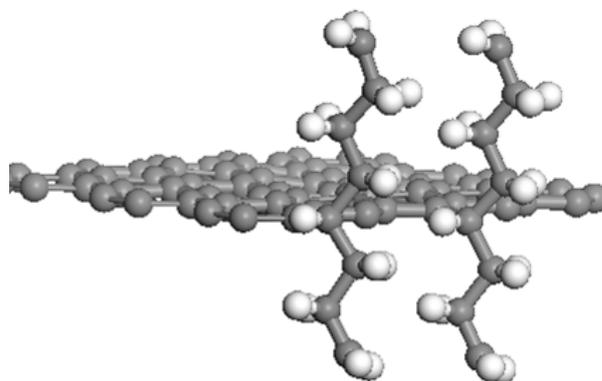
фигураций оксида, содержащая для упрощения расчетной процедуры только кислород, представлена на рис.3. Результаты моделирования обнаруживают формирование структурных дефектов в процессе окисления графена, причем показано существование различных типов связей О-графен со спектром энергий связи от 2 до 3.9 эВ. Рассчитанная картина распределения электронного заряда подтверждает наличие достаточно сильных ковалентных связей в структуре.



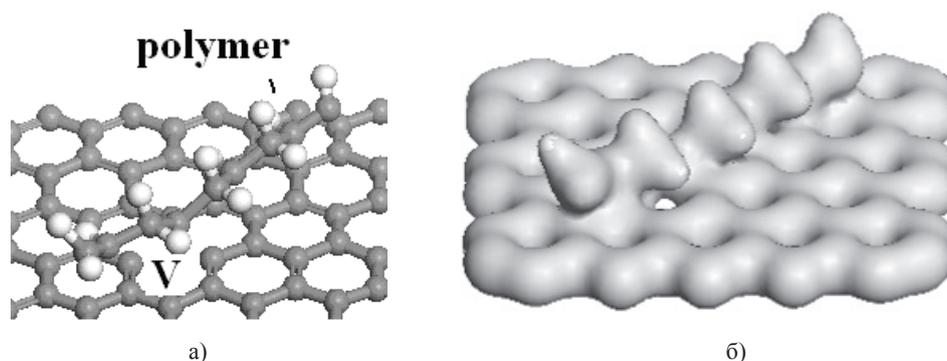
а) формирование связей О-графен и дефектов структуры;  
б) компьютерное изображение распределения электронного заряда в наноструктуре О-графен

**Рисунок 3** – Компьютерная модель фрагмента оксида графена

Рисунок 4 иллюстрирует особенности взаимодействия цепочечных молекул полимера с графеном. Расчеты показывают возможность формирования прочных ковалентных связей с энергиями 4-5 эВ по периметру (в зонах со свободными С-связями). Более слабое взаимодействие с поверхностью идеального графена сводится к обычным силам Ван-дер-Ваальса. Далее, было проведено моделирование взаимодействия полимера с поверхностью графена, содержащего вакансию (рис.5). Расчеты показали преимущественное сцепление молекулы с дефектной зоной. Распределение электронного заряда в нанокompозитной структуре подтверждает образование более прочной связи полимера с дефектом.



**Рисунок 4** – Компьютерная модель взаимодействия цепочечных молекул полимера с наноструктурой графена



а) фрагмент молекулы полимера с дефектом типа вакансии в графене;  
б) распределение электронного заряда

**Рисунок 5** – Моделирование взаимодействия фрагмента молекулы полимера с дефектом

Результаты расчетов показывают, что наличие дефектов в структуре графена способствует формированию прочных связей с молекулами полимера.

## Выводы

Построены компьютерные модели графеновых лент с дефектами – одиночными вакансиями, оксидных наносистем О- графен, выполнены

квантово-механические расчеты их энергетических и структурных характеристик. Выполнено компьютерное моделирование наносистем молекула полимера – графен. Расчеты показали, что наличие дефектов в структуре графена создает возможность формирования ковалентных прочных связей с молекулами полимера. Таким образом, подобные структуры создают реальную перспективу эффективного создания новых композитных материалов.

## Литература

- 1 Мырзабекова М.М., Байгаринова Г.А., Гусейнов Н.Р., Ильин А.М. Определение характеристик проводимости композитов на полимерной основе с наполнителями из графена и его родственных структур // Вестник КазНУ. – Серия физическая. – 2015. – №1(52). – С. 61-66.
- 2 Kuillaa T., Bhadrab S., Yaa D., et al. Recent advances in graphene based polymer composite // Progress in Polymer Science. – Elsevier.–2010. – P. 1350-1375.

- 3 Georgios M. Viskadourous, Minas M. Stylianakis, Emmanuel Kymakis, and Emmanuel Stratakis. Enhanced Field Emission from Reduced Graphene Oxide Polymer Composites // *ACS Appl. Mater. Interfaces*. – 2014. – №6 (1). – P. 388–393.
- 4 Ilyin A.M. Computer Simulation of Radiation Defects in Graphene and Relative Structures. In: “Graphene Simulation”, Gong, J.R.;Ed.;InTech: Rijeka, CR. – 2011. – 39.
- 5 Ilyin A.M., Guseinov N.R., Nemkaeva R.R., Tsyganov I.A., Asanova S.B., Kudryashov V.V. // *Nucl. Instrum. & Meth. Phys. Res. B*. – 2013. – Vol.315. – P.192.
- 6 Meng Cheng, Rong Yang, Lianchang Zhang, Zhiwen Shi, Wei Yang, Duoming Wang, Guibai Xie, Dongxia Shi, Guangyu Zhang. Restoration of graphene from graphene oxide by defect repair // *Carbon*. – Volume 50. – Issue 7. – June 2012. – P. 2581–2587.

#### References

- 1 Myrzabekova M.M., Baygarinova G.A., Guseynov N.R., Il'in A.M. // *Vestnik KazNU. – Seriya fizicheskaya*. №1(52). (2015). 61-66. (in russ).
- 2 Kuillaa T., Bhadrab S., Yaoa D., et al. Recent advances in graphene based polymer composite // *Progress in Polymer Science*. Elsevier. (2010). 1350-1375.
- 3 Georgios M. Viskadourous, Minas M. Stylianakis, Emmanuel Kymakis, and Emmanuel Stratakis. // *ACS Appl. Mater. Interfaces*. №6 (1). (2014). 388–393.
- 4 A.M. Ilyin, Computer Simulation of Radiation Defects in Graphene and Relative Structures. In : “Graphene Simulation”, Gong, J.R.;Ed.;InTech: Rijeka, CR 39 (2011).
- 5 A.M.Ilyin, N.R.Guseinov, R.R.Nemkaeva, I.A.Tsyganov, S.B.Asanova, V.V.Kudryashov // *Nucl. Instrum. & Meth. Phys. Res., B*, 315 (2013). 192.
- 6 Meng Cheng, Rong Yang, Lianchang Zhang, Zhiwen Shi, Wei Yang, Duoming Wang, Guibai Xie, Dongxia Shi, Guangyu Zhang. Restoration of graphene from graphene oxide by defect repair // *Carbon*. 50(7). (2012). 2581–2587.