

АДСОРБЦИОННЫЕ СЛОИ ГРАФЕНА НА КРИСТАЛЛИЧЕСКИХ ПОДЛОЖКАХ

Свечников А.Б.

НИЦ «Курчатовский институт», г.Москва

Свечников А.Б.
НИЦ «Курчатовский
институт»

В данной работе представлены результаты квантово-химических расчетов адсорбции нанополос графена на гранях (100) и (111) алмаза, кремния и кубического карбида кремния. Молекулярно-динамическое моделирование и поиск локальных минимумов в кластерном приближении были выполнены в рамках нового полуэмпирического приближения РМ7, заменившего менее точное РМ6 [1]. Расчет проводился для комнатной температуры.

Грани (100) карбида кремния. Слабая димеризация кремниевой грани (100) SiC и расстояние до графена в 0,21 нм являются результатом действия ван-дер-ваальсовых сил. Строение графена не изменяется, энергия адсорбции $\epsilon = 0,53$ эВ.

Характер адсорбции изменяется только на углеродной грани (100) SiC, как видно из рис.1.

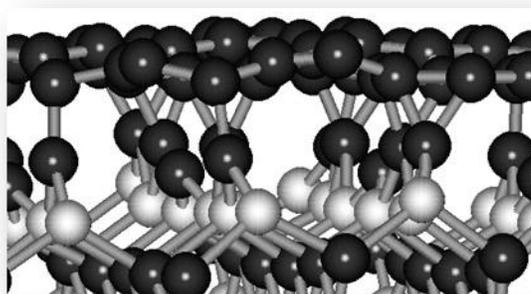
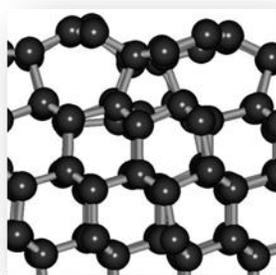


Рис.1 Графен на грани (100) C - SiC.

Часть атомов C подложки образует химические связи с атомами C графена, характерные расстояния C-C порядка 0,15 нм. Однако в самом графене происходит частичная регибридизация связей $sp^2 \rightarrow sp^3$, приводящая к заметному повышению полной энергии системы. Итоговый баланс энергий взаимодействия, с учетом структурной перестройки, дает энергию адсорбции лишь в 0,46 эВ.

Грань (111) алмаза. Адсорбированный графен свободно деформируется в гофropодобную модификацию, как показано на рис.2 а,б.

а)



б)

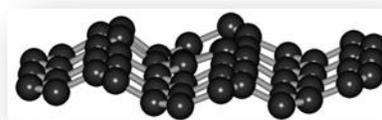


Рис.2 Графен на грани (111) алмаза (а). Отдельно адсорбированный гофро-графен (б).

Часть атомов гофро-графена, расположенные на дне волн, образуют химические связи с атомами подложки. Степень деформации кристаллической структуры

адсорбированного графена можно оценить по значениям внутренних длин связей $r(\text{C-C})$ и валентных углов $\alpha(\text{C-C-C})$. Так, на гребне волн $r = 0,146$ нм и $\alpha = 120^\circ$, близки к соответствующим величинам для идеального графена ($r = 0,142$ нм и $\alpha = 120^\circ$). На дне волн $r = 0,153$ нм и $\alpha = 110^\circ$, практически совпадают с характеристика алмаза ($r = 0,154$ нм и $\alpha = 109,5^\circ$). Таким образом, гофро-графен представляет собой сильно деформированный графен, а с точки зрения симметрии - это смесь sp^2 и sp^3 гибридных состояний. Длины связей между атомами графена и подложки равны $0,162$ нм. Структура на рис.2а является стабильной, но цена, которую приходится платить за модификацию структуры графена (рис.2б) достаточно высока, удельная энергия адсорбции $\varepsilon = 0,69$ эВ.

Выводы. Полученные данные характеризуют идеальный графен, как инертный материал по отношению к адсорбции на алмазные, кремниевые и карбид кремниевые подложки. Количественной мерой инертности служат низкие, менее 1 эВ, величины удельной энергии адсорбции. Наблюдаемое в ряде случаев образование химических связей между атомами графена и подложки, приводит к заметным структурным изменениям, например, образованию гофроподобной модификации графена. Последний факт можно рассматривать, как негативный для задач нанoeлектроники.

Литература

1. *Stewart J. J. P.* Optimization of Parameters for Semiempirical Methods V: Modification of NDDO Approximations and Application to 70 Elements // *J. Mol. Modeling*. 2007. V.13. P.1173-1213.