

## ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ ГРАФЕНА С Ca

<sup>1</sup>Тен Г.Н., <sup>1</sup>Глухова О.Е., <sup>1</sup>Слепченков М.М., <sup>1</sup>Мухамбеткалиев Б.Ш., <sup>2</sup>Баранов В.И.

<sup>1</sup> Саратовский государственный университет им. Н.Г. Чернышевского, г.Саратов

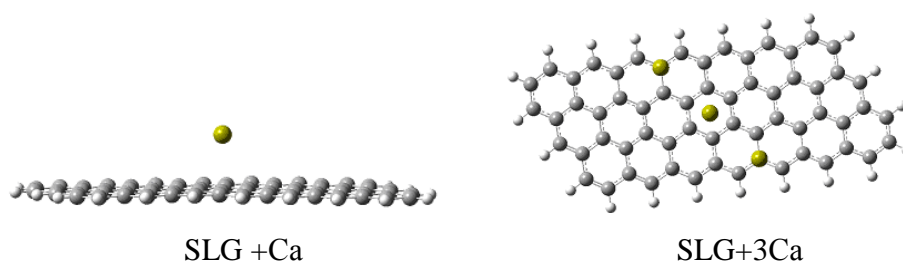
<sup>2</sup> Институт геохимии и аналитической химии им. В.И. Вернадского РАН, г.Москва

<sup>1</sup>Тен Г.Н.,  
<sup>1</sup>Глухова О.Е.,  
<sup>1</sup>Слепченков М.М.,  
<sup>1</sup>Мухамбеткалиев Б.Ш.,  
<sup>2</sup>Баранов В.И.  
<sup>1</sup>Саратовский  
государственный  
университет им.  
Н.Г. Чернышевского,  
г.Саратов  
<sup>2</sup> Институт геохимии и  
аналитической химии им.  
В.И. Вернадского РАН,  
г.Москва

Использование графена в качестве основы для нанесения на него монослоя из атомов Ca позволяет, согласно исследованиям авторов работы [1], создать молекулярную структуру со сверхпроводящими свойствами.

В данной работе были рассчитаны энергии взаимодействия комплексов SLG с одним и тремя атомами Ca. Расчёт был выполнен методом DFT с помощью программы Gaussian-09 и набора базисных функций 6-31g(d,p) [2].

На рис. приведена оптимизированная структура рассматриваемых молекулярных комплексов SLG +Ca и SLG+3Ca, а в таблице – соответствующие значения энергии.



Структура	Энергия (а.е.)	Комплекс	Энергия комплекса (а.е.)	Энергия связи (кДж/мол)
SLG	-2376.18617355			
Ca	-677.53709087	SLG +Ca	-3053.72027778	7.845
3Ca	-2032.61127261	SLG+3Ca	-4408.87179730	195.302

Согласно выполненному расчёту, увеличение концентрации Ca приводит к существенному увеличению (~8 раз) энергии взаимодействия атома Ca с графеновым листом. Такая сила притяжения будет удерживать атомы Ca от их перемещения перпендикулярно поверхности. Отметим также наблюдающуюся упорядоченность в расположении атомов Ca на поверхности SLG.

### Литература

1. Yang S.-L., Sobota J.A., Howard C.A., Pickard C.J., Hashimoto M., Lu D.H., Mo S.-K., Kirchmann P.S., Shen Z.-X. Superconducting graphene sheets in CaC<sub>6</sub> enabled by phonon-mediated interband interactions // Nature Communications. 5. Article number: 3493 doi:10.1038/ncomms4493
2. Frisch M.J., Trucks G.W., Schlegel H.B. et al. Gaussian 09. Gaussian Inc., Wallingford CT, 2009. 394 p.