

Курбанова Э.Д.¹, Белякова Р.М.¹, Ригмант Л.К.¹,
Галашев А.Е.¹, Полухин В.А.^{1,2}

¹) Институт Metallургии УрО РАН,
г. Екатеринбург

²) ФГАОУ ВПО «Уральский федеральный университет
им. первого Президента России Б.Н. Ельцина»,
г. Екатеринбург
kurbellya@mail.ru

ИССЛЕДОВАНИЕ МЕТОДОМ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ ВЛИЯНИЯ МЕХАНИЗМОВ СОРБЦИИ НА ТЕРМОСТАБИЛЬНОСТЬ ИНТЕРФЕЙСОВ D- МЕТАЛЛ/ ГРАФЕН*

Для детального изучения и сравнительного анализа физико-химических свойств интерфейсных гетероструктур переходный металл/графен (ТМе:, Cu /G) проведено МД-моделирование формирования интерфейсов. Для системы Pd-C энергия когезии составляет $E_b = -43.57 \cdot 10^2$ мэВ на атом углерода, а параметр решетки 0,385нм. Системы Ni/G и Cu/G имеют меньшие, но относительно близкие параметры (опытные значения их постоянных, соответственно, равны для Ni 0,352 нм и для Cu и 0,361 нм), но существенно различающиеся энергиями потенциальных ям для профилей энергий связи Ni-G $E_b = -91.33 \cdot 10^2$ мэВ нм⁻²/атом С, а для Cu-G $E_b = -24,81 \cdot 10^2$ эВ нм⁻²/атом С (электронные оболочки в атоме Cu в отличие от Ni заполнены полностью).

Различие в характере энергий связи для гетероструктур Cu/G и Ni/G определяется спецификой их электронных зонных структур, как следует из анализа электронных состояний их интерфейсов и характера сорбции, соответственно, физической адсорбции и хемосорбции. Так для системы Cu/G при межатомных расстояниях $d_{C-Cu} = 0,2243$ нм уровень Ферми приближен к зонам Cu, инициируя электронный перенос от π зон графенового слоя к зонам металла, в то время как для расстояний $d_{C-Cu} = 0,326$ нм перекрывание p_z орбиталей атомов С и d_z орбиталей атомов Cu слабое, и электронный перенос идет из зон металла к таковым в слое G. В табл. 1 приведены для сравнения результаты, полученные с применением первопринципных подходов, а на рис. 1 их представление (с элементарными ячейками при совмещении ТМе/G с параметрами $a_{G1} = 0,246$ нм и $a_{G2} = 0,492$ нм с

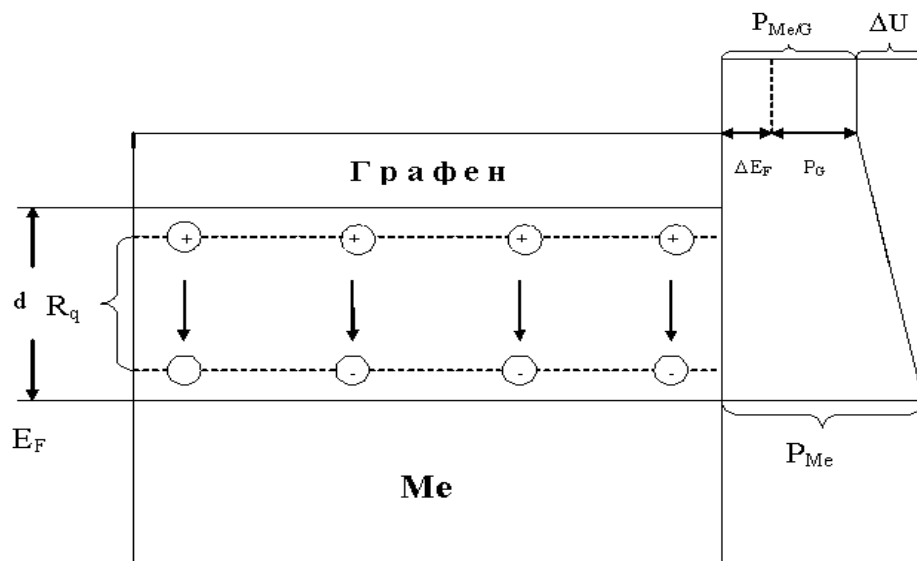
* Работа поддержана Отделением химии и наук о материалах РАН (проект №12-Т-3-1022).

поверхностями (111), соответственно, из 4 атомов углерода вокруг одного центрирующего атома металла Ni, Co, Cu (рис. 1б) и суперячейки из 8 атомов углерода и 3 центрирующих атомов металла ГЦК-плоскостей Pd, Pt, Au, Ag и Al, рис. 1в). В левой половине (физическая адсорбция) расположены металлы с интерфейсом (с энергией связи плоскостей графена и металла E_c в расчете на 1 атом углерода в условно выбранном интервале величин $0,03 \text{ эВ} < E_c < 0,052 \text{ эВ}$ и длиной связей ТМe-C по нормали к плоскости интерфейса $d > 0,3 \text{ нм}$), классифицируемым как физико-адсорбционный, а в правой (хемосорбция)-хемосорбционный (с энергией в пределах $0,1 \text{ эВ} < E_c < 0,4 \text{ эВ}$ и со связями длиной $d < 0,25 \text{ нм}$). Зарядовый допинг, Δq . Значение межатомных расстояния d . Сдвиг энергии Ферми ΔE_F .

Таблица 1

Результаты, полученные с применением первопринципных подходов

Сорбция	Физическая адсорбция (допинг)							Хемосорбция (с перекрытием π - d связей)				
	Cd	Al	Ag	Au	Cu	Pt	Ir	Pd	Ru	Co	Ni	Ti
E_c , эВ/атом	0,030	0,031	0,03	0,03	0,03	0,04	0,03	0,09	0,13	0,41	0,14	0,39
$-\Delta q, 10^2$ $\cdot e^-$	-	0,3	0,7	0,78	0,81	0,11		0,13		0,23	0,21	
d	0,36	0,57	0,32	0,33	0,31	0,32	0,31	0,28	0,23	0,21	0,21	0,21
ΔE_F , эВ	0,44	0,49	0,35	0,20	0,19	0,15	-0,2					



a



б

в

Рис. 1. Схема изменения электронной структуры (*a*) в координациях $C_4(Ni,Cu)$ (*б*), C_8Pd (*в*)