Адсорбция атранов на двумерном карбиде кремния: роль дефектов структуры

Созыкин С.А. [1] , *Барташевич Е.В* [1]

sozykinsa@susu.ru
[1] ЮУрГУ (НИУ), Челябинск, Россия

Функционализация графена позволяет в широких пределах изменять его электронную структуру и физико-химические свойства, в частности сорбционные, которые важны, например, при создании механически прочных композиционных материалов, а также для приложений электроники. Ранее мы оценили влияние одиночных атомов замещения кремния и дефектов типа вакансии на связывание производных бисфенола с графеном [1]. В настоящей работе сообщается о влиянии вакансий на адсорбцию силатранов (5-аза-2,8,9-триокса-1-силабицикло[3.3.3]-ундекан) [2] и герматранов (5-аза-2,8,9-триокса-1-гермабицикло[3.3.3]-ундекан) графеном с регулярно расположенными атомами замещения кремния в большой концентрации.

В качестве адсорбирующей подложки рассматривались графен, гексагональный карбид кремния (SiC-h), 25% допированный графен с атомами кремния в мета- (SiC-m), в орто- и пара-положениях (SiC-op) [3]. Исследовалась адсорбция шести производных (хлор-, хлорметил-, метил-, фенил-, метокси-, винил- и фтор-) силатрана и герматрана.

Моделирование методом функционала электронной плотности проводилось в полноэлектронной программе CRYSTAL17 [4] и псевдопотенциальной SIESTA [5], использующих атомноподобные базисные наборы. Расчетная ячейка при моделировании поверхностей была прямоугольной. Суммарное количество атомов углерода и кремния для каждой из моделей подложки составляло 120.

Анализ свойств электронной плотности проводился по результатам расчетов в программе CRYSTAL, а энергии взаимодействия молекул с поверхностью оценивались по данным программы SIESTA. Результаты свидетельствуют о том, что производные силатранов связываются в поверхностью сильнее соответствующих производных герматранов. Для метил-, метокси- и винил- силатранов и герматранов наиболее сильное связывание наблюдается с поверхностями SiC-m и SiC-op. Для остальных силатранов взаимодействие с подложками карбида кремния сильнее, чем для графена. Влияние вакансии на взаимодействие молекулы с поверхностью оценивалось для нескольких производных силатрана, как демонстрирующих более сильное связывание по сравнению с производными герматранов.

Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ (грант № 22 13 00170).

Ссылки

1. Bartashevich E.V., Levina E.O., Yushina I.D., Sozykin S.A., Tsirelson V.G., Physical Chemistry Chemical Physics (2023), 25, 24342.
2. Strelkova I.V., Korlyukov A.A., Lazareva N.F., Smirnov V.I., Chemical Physics (2024), 578, 112153.
3. Nguyen D.K., Tran N.T.T., Chiu Y.H., Gumbs G., Lin M.Fa., Scientific Reports (2020), 10, 12051.
4. Dovesi R., Erba A., Orlando R., Zicovich-Wilson C.M., Civalleri B., Maschio L., Rérat M., Casassa S., WIREs: Computational Molecular Science (2018), 8, e1360.
5. Soler J.M., Artacho E., Gale J.D., Garc A., Junquera J., Ordej P., Daniel S., Journal of Physics: Condensed Matter (2002), 14, 2745.