

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 с 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 РФФИ (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., Civalieri B., Maschio L., Rérat M., Casassa S., *WIREs: Computational Molecular Science* (2018), 8, e1360.
5. Soler J.M., Artacho E., Gale J.D., Garcia A., Junquera J., Ordej P., Daniel S., *Journal of Physics: Condensed Matter* (2002), 14, 2745.