

Упругие характеристики псевдо-графеновых кристаллов

Рожков М.А.^{1,2}, Колесникова А.Л.^{1,3}, Романов А.Е.^{1,2}

MARozhkov@itmo.ru

¹ Университет ИТМО, Санкт-Петербург, Россия

² ФТИ им. А.Ф. Иоффе, Санкт-Петербург, Россия

³ ИПМаш РАН, Санкт-Петербург, Россия

Графен — это двумерный кристалл углерода, обладающий множеством перспективных характеристик [1], который привлек большое внимание и ознаменовал активный рост интереса к изучению двумерных кристаллов. Исследование влияния дефектов на характеристики важно для прогнозирования свойств полученных образцов кристаллов графена, а также для управления их характеристиками. Например, наличие интерфейса в графене может увеличить его электропроводность [2].

Существует ряд работ, в которых исследуются двумерные углеродные кристаллы, отличные от графена. В таких кристаллах можно наблюдать высокую плотность атомных колец углерода с дефектами, организованными периодически. Данные сетки дефектных углеродных колец также являются плотными сетками разнознаковых клиновых дисклинаций. Эти кристаллы обычно называют «аллотропами графена» [3], «аллотропами углерода» [4], «псевдо-графенами» [5] и т.д. Исследование подобных кристаллов позволит спрогнозировать не только их характеристики, но и служить ориентиром для исследователей, которые будут пытаться синтезировать подобные кристаллы. Например, кристалл бифинелена, который был ранее предсказан теоретически, был успешно синтезирован [6].

В настоящей работе проведено моделирование упругих характеристик графена и псевдо-графенов, которые состоят из 4-, 5-, 6-, 7- и 8-звенных углеродных колец. Для выполнения поставленной задачи был использован метод молекулярной динамики, в совокупности с использованием различных потенциалов межатомного взаимодействия (например, AIREBO, Tersoff и LCBOF). Проведено сравнение значений упругих характеристик, полученных с помощью потенциалов межатомного взаимодействия. Продемонстрирована ограниченность применения существующих к настоящему времени потенциалов при моделировании псевдо-графеновых кристаллов.

Ссылки

1. A.C. Neto, F. Guinea, N.M. Peres, K.S. Novoselov, and A.K. Geim, *Reviews of modern physics* (2009) 81(1), 109.
2. A. Bagri, S.P. Kim, R.S. Ruoff, and V.B. Shenoy, *Nano letters* (2011) 11(9), 3917.
3. Z. Wang, X.F. Zhou, X. Zhang, Q. Zhu, H. Dong, M. Zhao, and A.R. Oganov, *Nano letters* (2015) 15(9), 6182.
4. S. Zhang, J. Zhou, Q. Wang, X. Chen, Y. Kawazoe, and P. Jena, *Proceedings of the National Academy of Sciences* (2015) 112(8), 2372.
5. N.D. Abramenko, M.A. Rozhkov, A.L. Kolesnikova, and A.E. Romanov, *Reviews on Advanced Materials and Technologies* (2020) 2(4), 9.
6. Q. Fan, L. Yan, M.W. Tripp, O. Krejčí, S. Dimosthenous, S.R. Kachel, M. Chen, A.S. Foster, U. Koert, P. Liljeroth, and J.M. Gottfried, *Science* (2021) 372(6544), 852.