

МОДЕЛЮВАННЯ ВЗАЄМОДІЇ АТОМІВ З
ГРАФЕНОПОДІБНИМ ФОСФІДОМ ІНДІЮ

Горбенко В.І., к.ф.-м.н., доцент

Запорізький національний університет, м. Запоріжжя, Україна

Abstract. The semiconductor compounds in a state of graphene-like structure are the interesting object for both fundamental studies and technology. The understanding of the nature of chemical interaction with various species is important. The geometry optimisation graphene-like structure of indium phosphide and the definition of preferred adsorption sites of H, O and C adatoms on g-InP surface have been performed by using GAMESS program package. As a result the potential-energy (PE) profiles of interaction of the various atoms-probe with g-InP sheet have been obtained.

Ключові слова: ГРАФЕНОПОДІБНИЙ МАТЕРІАЛ, G-INP, МЕТОД АТОМНО-СИЛОВОГО ПРОБНИКА, ВОДЕНЬ, КИСЕНЬ, ВУГЛЕЦЬ, GAMESS.

Відкриття двовимірного матеріалу графену дало початок цілому напрямку досліджень двовимірних графеноподібних структур різноманітних сполук [1, 2]. Особливе місце серед графеноподібних матеріалів займають напівпровідникові сполуки, тому що у більшості своїй їх властивості та технологічні умови виготовлення достатньо добре вивчені, а розширення знань на двовимірні структури дає певні перспективи технічного застосування. З наукової та технологічної точок зору є важливим розуміння хімічної взаємодії різноманітних частинок з поверхнею нових матеріалів та виявлення впливу цієї взаємодії як на стабільність структури, так і на основні властивості матеріалів. Такі речовини як водень, кисень та вуглець входять до складу багатьох природних сполучень, що оточують матеріали під час їх створення, обробки та подальшого використання. Тому головною задачею цієї роботи було визначення центрів адсорбції атомів Н, О та С за допомогою побудови профілів потенціальної енергії їх взаємодії з шаром графеноподібного фосфіду індію.

Розрахунки виконано за допомогою програмного пакету GAMESS методом Хартри-Фока з базисними наборами STO-3G та 3-21G [3]. Для обчислень використовувались кластери Інституту кібернетики НАНУ ім. В.М.Глушкова. У розрахунках шар графеноподібного InP був представлений кластерною моделлю із 48 атомами In та 48 атомами P у гексагональних комірках та 24

атомами водню по периметру кластера. Для отримання профілю потенціальної енергії взаємодії визначеного атому із шаром g-InP використовувалась техніка атомно-силового пробника. Для цього відповідний атом-пробник переміщувався над графеновим шаром на певній постійній відстані рис.1.

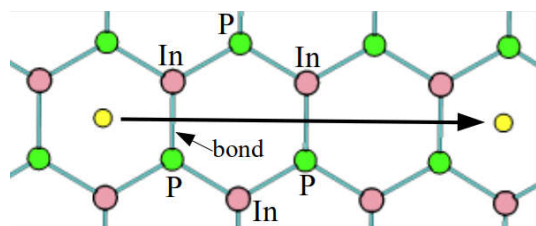


Рисунок 1 – Схема переміщення атому пробника над поверхню шару g-InP

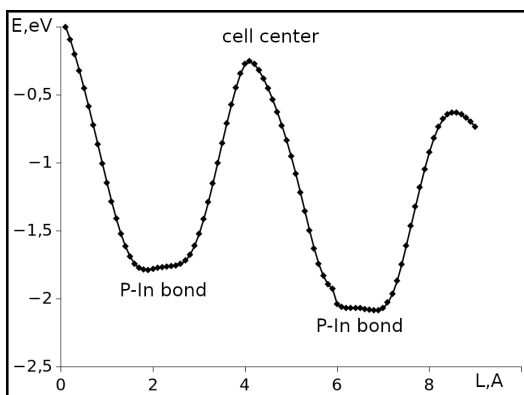


Рисунок 2 – Профіль потенціальної енергії для атому водню

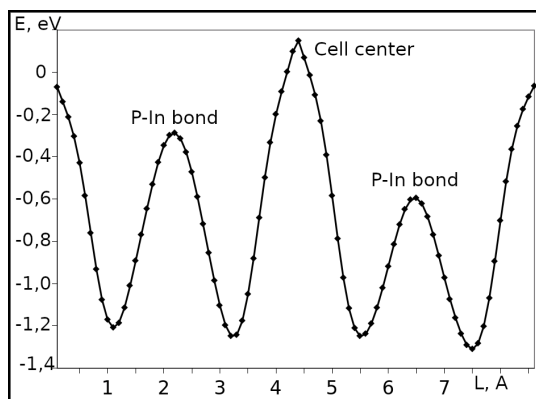


Рисунок 3 – Профіль потенціальної енергії для атому вуглецю

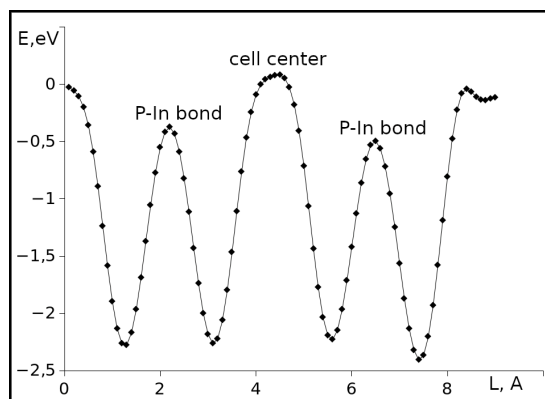


Рисунок 4 – Профіль потенціальної енергії для атому кисн

В якості результату були отримані профілі потенціальної енергії взаємодії різних атомів з поверхнею g-InP та визначені центри адсорбції цих атомів на поверхню g-InP (рис.2-4).

References

1. Geim A.K. The rise of graphene / A.K.Geim, K.S.Novoselov. - Nature Materials v.6, 2007, p.183-191.
2. Xu M. Graphene-Like Two-Dimensional Materials / M.Xu,T.Liang,M.Shi,H.Chen // Chem. Rev. 2013, 113, 5, p.3766-3798.
3. Gordon M.S. Advances in electronic structure theory: GAMESS a decade later / M.S.Gordon, M.W.Schmidt // in "Theory and Applications of Computational Chemistry: the first forty years" by ed. C.E.Dykstra. - Elsevier, Amsterdam, 2005, p.1167-1189.