

ГИДРОГЕНИЗАЦИЯ ГРАФЕНА: ТЕОРЕТИЧЕСКИЕ ИССЛЕДОВАНИЯ

А.Н. Панченко, студент
Волгоградский государственный университет
(Россия, г. Волгоград)

DOI:10.24412/2500-1000-2023-6-4-128-131

Аннотация. была рассчитана элементарная ячейка графена с использованием квантово-химического метода DFT с потенциалом V3LYP. Выполненные квантово-химические расчеты позволили установить ориентацию атома водорода над поверхностью графена, при которой происходит образование адсорбционного комплекса «графен – атом водорода». Расчет множественной адсорбции атомов водорода на графене позволил установить наиболее выгодное расположение адсорбированных атомов на поверхности слоя.

Ключевые слова: графен, адсорбция, гидрогенизация, графан, атом водорода.

В наши дни все чаще слышно о нанотехнологиях. Нанотехнологии открывают большой спектр возможностей в разных областях: физике, химии, биологии, и т.д. Данная область знаний позволила человечеству по-новому взглянуть на жизнь и мир в целом. Еще совсем недавно использование графена в нанoeлектронике казалось невозможным. Но в наши дни существует уже несколько способов получения графена. Изучено большинство его свойств, но на этом ученые не останавливаются. Но не только высочайшей прочностью графен обязан такому пристальному вниманию. Хотя этого уже достаточно, для того, чтоб большинство лабораторий мира занимались этим материалом. В графене электроны ведут себя словно релятивистские частицы с нулевой массой покоя и движутся со скоростью 10^6 м/с. В электронике у графена есть конкурент – кремний. Так вот скорость электронов в графене, благодаря вышеописанным свойствам, в сотню раз превышает этот показатель у кремния.

Графан представляет из себя двумерный материал – химическую разновидность

графена, в которой один атом углерода связан с тремя атомами углерода и одним атомом водорода. Он представляет из себя гидрогенизированный графен. В отличие от графена, графан это диэлектрик и химически активный материал. Нагревание графана ведет к отсоединению атомарного водорода, и графан становится графеном [6].

На рис. 1 изображена кристаллическая структура графена и графана ((А) и (В) соответственно). Синим цветом выделены атомы углерода, а красным – водорода, а – это длина связи между атомами углерода, d – это постоянная кристаллической решетки (графена и графана соответственно). Измерения, которые были проведены просвечивающим электронным микроскопом, дали следующие данные для графана: $a = 1,42$ А, $d = 2,42$ А, которые практически одинаковые с аналогичными параметрами для графена, которые равны: $a = 1,42$ А, $d = 2,46$ А. Теоретические расчеты прогнозируют для графана значения a и d , которые равны: $a = 1,53$ А (расхождение с теорией) и $d = 2,42$ А (согласие с теорией).

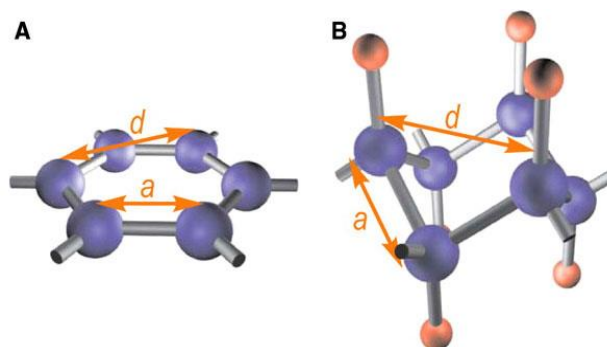


Рис. 1. Кристаллическая структура графена (А) и графана (В)

Графан, в отличие от графена, являющегося проводником электрического тока, диэлектрик. Прибавление атомов водорода к графену даст возможность получать на нем фрагменты графана. Подобными фрагментами диэлектрика будет возможно, например, разделить лист исходного материала на множество проводящих полос [1-3].

Кроме этого возможно найти применение новому материалу в водородной энергетике. В частности, нагревание графана ведет к освобождению атомарного водорода. Напомним, что одна из главных проблем водородной энергетики – это создание эффективных способов хранения водорода. Одним из наиболее перспективных направлений исследований является получение материалов, способных хранить «топливо» в связанном состоянии, в данном случае в виде графана [4].

Атом водорода был выбран только для начала. Водород это самое простое, что возможно было попробовать, в качестве реагента. Сейчас ведется деятельность по модифицированию графена остальными элементами, которые смогут позволить изменять запрещенную зону модификаций графена и тип проводимости, получив необходимые полупроводниковые свойства.

Сегодняшняя полупроводниковая индустрия пользуется всей периодической таблицей, от полупроводников и металлов до диэлектриков. Один материал, возможно, может быть модифицирован так, что будет покрывать полный спектр электрических свойств, необходимых для использования в электронике [5-6].

Поэтому в работе была исследована возможность множественной адсорбции атомов водорода на ближайшие атомы углерода поверхности графена (рис. 2).

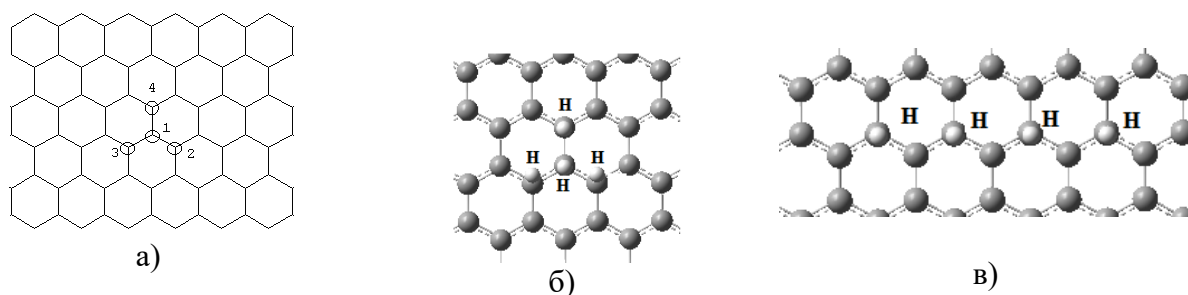


Рис. 2. Графен с указанием положений адсорбирующихся на поверхности атомов водорода

В присутствии одного атома водорода, отмеченного цифрой 1, на графен присоединялся второй атом водорода, затем уже рядом с двумя атомами Н помещался третий и, наконец, четвертый (рис. 2а.).

Результаты расчетов энергетических характеристик данных процессов представлены в таблице. Итак, выполненные исследования установили, что множественная адсорбция атомов Н на поверхности графена возможна.

Таблица. Энергий адсорбции, длины связей С-Н

Число атомов Н	1	2	3	4
$E_{ад}, \text{эВ}$	-0.59	-0.73	-1.94	-1.29
$r_{\text{C-H}}, \text{Å}$	1.1	1.1	1.18	1.15

Далее рассматривалось наиболее энергетически выгодное расположение атомов водорода на графене. Для четырех атомов водорода было предложено два варианта их расположения на кластере графена

(рис. 2б, 2в). Полная оптимизация геометрии позволила установить особенности поведения графена от варианта расположения атомов водорода на нем (рис. 3).

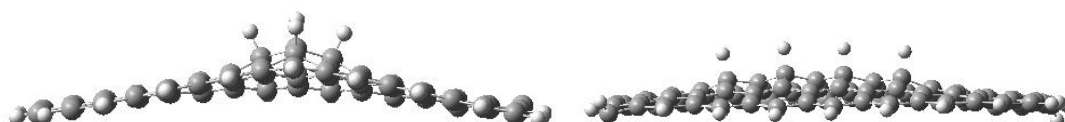


Рис. 3. Графен с атомами водорода после оптимизации параметров

Сравнение полных энергий систем позволило установить, что энергетически более выгодным является структура, с распо-

ложением атомов водорода над атомами, находящимися в различных гексагонах.

Также было рассмотрено различное расположение 10 атомов водорода (рис. 4).

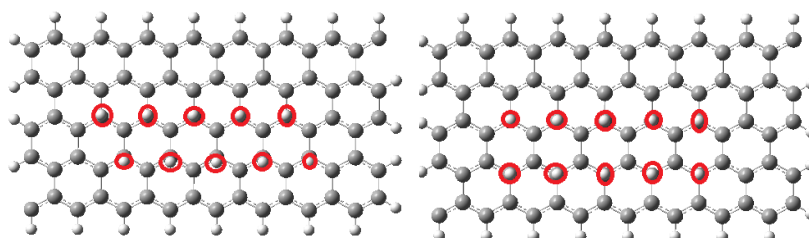


Рис. 4. Различное расположение десяти атомов водорода на графене

Энергетически более выгодным является расположение атомов водорода над углеродом, расстояние между которыми рав-

но 2,8 Å. На рисунке 5 показана структура графена с атомами водорода, при полной оптимизации геометрии.

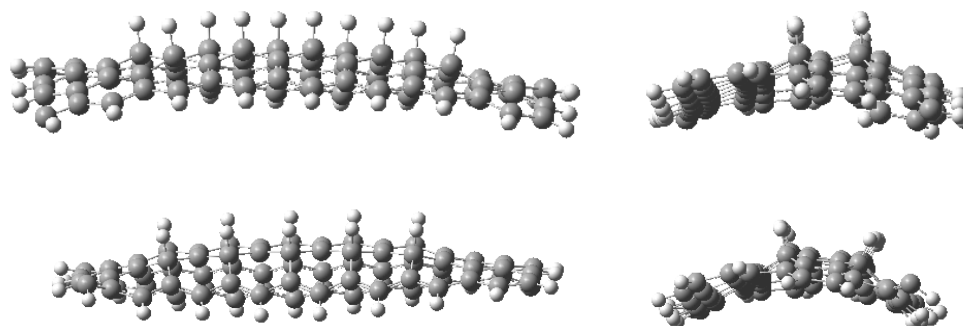


Рис. 5. Графен с атомами водорода, расположенными различным способом

В работе была рассчитана элементарная ячейка графена с использованием метода DFT с потенциалом B3LYP. Выполненные квантово-химические расчеты позволили

установить ориентацию атома водорода над поверхностью графена, при которой происходит образование адсорбционного комплекса «графен - атом водорода». Рас-

чет множественной адсорбции атомов водорода на графене позволил установить наиболее выгодное расположение адсор-

бированных атомов на поверхности слоя. Была показана возможность части графена превратить в графан.

Библиографический список

1. Саранча, А.М. Графен – будущее электроники / А.М. Саранча, А.М. Гиль // Ростовский научный журнал. – 2019. – № 1. – С. 468-473.
2. Иванов, Н.В. Графен – это революционный материал 21 века? / Н.В. Иванов // Столица науки. – 2018. – № 1(1). – С. 2-5.
3. Мычко, Д.И. Графен – перспективный материал нанoeлектроники / Д.И. Мычко // Химия для школьников. – 2017. – № 1. – С. 41-44.
4. Разумов, В.Ф. Графен – новый прорыв в области нанотехнологий / В. Ф. Разумов // Российские нанотехнологии. – 2010. – Т. 5, № 11-12. – С. 17-22.
5. Новое аллотропное состояние углерода – графен / В.В. Стюхин, Э.В. Лапшин, О.А. Журавлев, С.А. Обоенков // Труды международного симпозиума «Надежность и качество». – 2011. – Т. 2. – С. 211-213.
6. Новое аллотропное состояние углерода – графен / В.В. Стюхин, Э.В. Лапшин, О.А. Журавлев, С.А. Обоенков // Труды международного симпозиума «Надежность и качество». – 2011. – Т. 2. – С. 211-213.

HYDROGENATION OF GRAPHENE: THEORETICAL RESEARCH

A.N. Panchenko, *Student*
Volgograd State University
 (Russia, Volgograd)

Abstract. *A graphene unit cell was calculated using the DFT quantum chemical method with a B3LYP potential. The quantum chemical calculations made it possible to establish the orientation of the hydrogen atom above the graphene surface, at which the formation of the adsorption complex "graphene - hydrogen atom" occurs. The calculation of multiple adsorption of hydrogen atoms on graphene made it possible to establish the most advantageous location of the adsorbed atoms on the surface of the layer.*

Keywords: *graphene, adsorption, hydrogenation, graphane, hydrogen atom.*