

## ГРАФЕН В КАЧЕСТВЕ НАНОФИЛЬТРА ДЛЯ АТОМОВ И ИОНОВ

Свечников А.Б.

НИЦ «Курчатовский институт», г.Москва

Свечников А.Б.  
НИЦ «Курчатовский  
институт»

Представлено теоретическое исследование процессов прохождения атомных частиц сквозь однослойный графен. Пороговые энергетические потери бомбардирующих частиц были получены с помощью метода молекулярной динамики и квантового расчета сил. Показана возможность графена выступать в роли фильтра легких атомных частиц.

Недавнее сообщение [1] о возможности опреснения морской воды при помощи пористого ( $d > 0,7$  нм) графена вызвало большой интерес у специалистов. Получение пористого графена явилось объектом интенсивных исследований с использованием ионной бомбардировки. С бездефектным графеном ситуация выглядит иначе, обращает на себя внимание, прежде всего, плотная гексагональная атомная упаковка, и как следствие, характерные механическая прочность и химическая стойкость.

Было сделано предположение, что при определенных условиях графен в состоянии пропускать сквозь себя частицы и выполнять функцию фильтра. В число таких частиц могли попасть химические элементы с малыми атомными (ионными) радиусами и с характерными кинетическими энергиями. Для выяснения данного вопроса были проведены расчеты по методу молекулярной динамики. С целью повышения точности, межатомное взаимодействие моделировалось в рамках квантово-химического приближения PM6 [2]. В бомбардировке участвовали атомы, положительные и отрицательные ионы водорода, элементов 2 и 3 периодов, несколько тяжелых щелочных металлов. Диапазон кинетических энергий был достаточно широк, от 0,05 эВ до 60 эВ.

Полученные результаты представлены на рис.1. На оси ординат показаны пороговые значения потерь кинетической энергии бомбардирующих частиц (E, эВ). Горизонтальная линия на уровне -17,5 эВ соответствует потерям энергии, приводящим в образованию одиночной вакансии в графене, и получена в рамках использованной расчетной схемы.

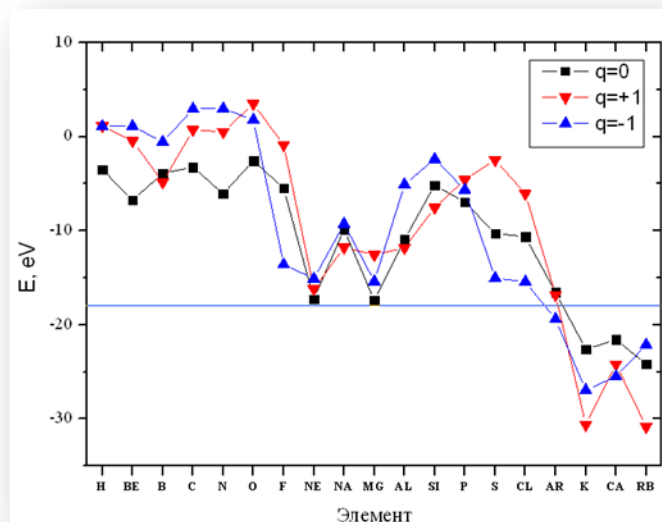


Рис.1 Пороговые энергетические потери частиц при прохождении сквозь графен. Результат молекулярно-динамического моделирования в силовом поле PM6.

Из полученных зависимостей следует, что графен может выступать в качестве фильтра для частиц на основе элементов второго периода, кроме Ne, и нескольких элементов третьего периода. Частицы, Ne, Mg, Ar и всех последующих элементов, не в состоянии проникнуть сквозь монослойный графен без создания механических

повреждений.

Механизм фильтрации представляет собой внедрение бомбардирующей частицы в графен, часто с образованием химических связей и заметными деформациями в углеродном окружении. Затем нестабильное состояние распадается, и частица "выстреливает" в направлении, близком к первоначальному.

#### **Литература**

1. *Cohen-Tanugi D., Grossman J.C.* Water desalination across nanoporous graphene // *Nano Lett.*, 2012, V.12. N.7. P. 3602–3608.
2. *Stewart J. J. P.* Optimization of Parameters for Semiempirical Methods V: Modification of NDDO Approximations and Application to 70 Elements // *J. Mol. Modeling.* 2007. V.13. P.1173-1213.