

Изучение взаимодействия адатомов углерода на поверхностях железа (001) и (111) методом первопринципной молекулярной динамики

Мутигуллин Илья Васылович¹

аспирант

Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, Москва, Россия

E-mail: mutigullin@gmail.com

Использование металлических катализаторов при выращивании углеродных наноструктур становится широко распространенным в последние годы [1, 2]. Однако процессы, приводящие к образованию графитовых слоев и, как следствие, углеродных наноструктур на атомарном уровне до сих пор не ясны. Поэтому особый интерес представляет теоретическое изучение характера взаимодействия отдельных атомов углерода на поверхностях металла.

В данной работе методом первопринципной динамики на основе теории функционала плотности с использованием базиса плоских волн и PAW-потенциалов исследовалось взаимодействие адатомов углерода на поверхностях (001) и (111) ОЦК-железа.

Полученные результаты позволяют сделать вывод, что на поверхностях (001) и (111) железа адатомам углерода энергетически не выгодно располагаться в положении ближайших соседей, что находится в согласии с результатами, полученными для углерода на поверхности (001) железа в работах [3, 4]. Можно утверждать, таким образом, что адатомы углерода на поверхностях (001) и (111) железа предпочитают образовывать некомпактные углеродные кластеры.

Литература:

1. M. Yudasaka, Y. Kasuya, F. Kokai, K. Takahashi, M. Takizawa, S. Bandow, S. Iijima (2002) Causes of different catalytic activities of metals in formation of single-wall carbon nanotubes // *Appl. Phys. A* **74**, 377-385.
2. Z.P. Huang, D.Z. Wang, J.G. Wen, M. Sennett, H. Gibson, Z.F. Ren (2002) Effect of nickel, iron and cobalt on growth of aligned carbon nanotubes // *Appl. Phys. A* **74**, 387-391.
3. G. Panaccione, J. Fujii, I. Vobornik, G. Trimarchi, N. Binggeli, A. Goldoni, R. Larciprete, G. Rossi (2006) Local and long-range order of carbon impurities on Fe(100): Analysis of self-organization at a nanometer scale // *Phys. Rev. B* **73**, 035431.
4. C. Uebing (1994) Equilibrium surface segregation of interstitials on bcc (001) surfaces: A lattice-gas approach // *Phys. Rev. B* **50**, 12138.

¹ Автор выражает признательность к.ф.-м.н. Бажанову Д.И. за помощь в подготовке тезисов.