

Исследование центров зарождения алмаза в разориентированном биграфене с функционализированной водородом поверхностью

Буйлова М.А.^{1,2}, Ерохин С.В.², Сорокин П.Б.^{1,2}

builova.ma@phystech.edu

¹ Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет), Москва, Россия

² Лаборатория цифрового материаловедения, Национальный исследовательский технологический университет «МИСИС», Москва, Россия

Двумерные углеродные структуры алмазоподобного типа, толщиной в несколько атомных монослоев (диаманы [1]), образуются вследствие установления ковалентных связей между соседними слоями в двух- или многослойном графене. Формирование подобных межплоскостных связей инициируется химической функционализацией поверхности графена, например, адсорбцией атомарного водорода. Решающим обстоятельством, определяющим принципиальную возможность гидрирования и последующего синтеза межслоевых фаз с sp^3 -гибридизацией, является контроль над взаимной ориентацией (углом поворота) графеновых монослоев. Изменение угла относительного поворота в биграфене напрямую сказывается на кристаллографии образующейся алмазной плёнки. Для предсказания свойств диамана при заданной разориентации слоёв необходимы методы многомасштабного атомистического моделирования. В представленном исследовании разработан машинно-обучаемый потенциал (МОП) [2] пакета MLIP, предназначенный для моделирования процессов нуклеации алмазной фазы в разориентированном биграфене. Обучение МОП проводилось на наборе структур графена, двумерного алмаза и их гидрированных производных, оптимизированных в рамках теории функционала плотности (пакет VASP). Полученный потенциал воспроизводит значения энергий и сил для данных систем, а также описывает динамику гидрирования двуслойного графена и сопутствующее образование ковалентных межслоевых связей. С использованием обученного МОП выполнен анализ эволюции алмазной фазы в биграфене при разориентации слоёв на 5°, 6°, 7°, 10° и 13°. Обнаружено, что энергия образования увеличивается с числом атомов водорода, что может указывать на нуклеацию водородного кластера на поверхности биграфена. Процесс гидрирования способствует расширению области фазы кубического алмаза вплоть до формирования упаковки типа AA', которая благоприятствует образованию лонсдейлита. Полученные теоретические результаты согласуются с данными экспериментальных наблюдений: микроструктурный анализ плёнки в различных локальных участках демонстрирует неоднородный характер перехода.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант № 24-79-10299).

Ссылки

1. Sorokin P. B., Yakobson B. I. The properties, thermodynamics and application prospects of diamanes // npj Computational Materials. 2026. V. 12. P. 66.
2. Builova M. A., Erohin S. V., Sorokin P. B. Machine Learning Potential to Model the Diamond Phase Nucleation in Misoriented Bilayer Graphene // Journal of Structural Chemistry. 2024. V. 65. P. 1595-1602.