

Нанопора в графене как адсорбционный центр

Давыдов С.Ю.¹, Посредник О.В.²

lesya1976@mail.ru

¹ ФТИ им. А.Ф. Иоффе, Санкт-Петербург, Россия

² Санкт-Петербургский государственный электротехнический университет (ЛЭТИ), Санкт-Петербург, Россия

Первоначальный интерес к пористому графену возник более 15 лет назад и был связан с получением мембран для разделения различных химических смесей. Затем внимание сместилось к биосенсорам (для детектирования, например, ДНК и РНК). Сейчас активно обсуждаются возможности использования пористых углеродных материалов для извлечения редкоземельных металлов из окружающей среды (см. [1] и приведенные там ссылки). Современное состояние получения, изучения свойств и использования пористого графена рассмотрены в обзорах [2]. Сейчас принята следующая классификация пор: микропоры менее 2 nm, мезопоры от 2 до 50 nm и макропоры более 50 nm. Здесь под нанопорами будем понимать микро- и мезопоры, а однослойный графен, содержащий такие поры, будем именовать нанопористым графеном (NPG – nanopores graphene). В настоящей работе рассмотрен случай адсорбции непосредственно на нанопоре и проведено сравнение с адсорбцией на идеальном однослойном графене (SLG – single layer graphene).

Адсорбция на кромке поры в однослойном графене рассмотрена двумя способами: 1) в рамках упрощенной модели поверхностного димера [3] и 2) в рамках стандартной теории адсорбции с использованием низкоэнергетического приближения [4]. Численные оценки выполнены для адсорбции атомов редкоземельных металлов (РЗМ). Оценки показали, что адатомы, находящиеся на кромке поры, сильнее связаны с подложкой, чем атомы, адсорбированные на идеальном графене. Оценка влияния пор на остальной графеновый лист, рассматривается как разупорядочение последнего, что приводит к понижению его адсорбционной способности. Во всех рассмотренных случаях переход заряда с РЗМ на графена составляет величину $\sim 0.9e$, где e – элементарный заряд, величина энергии адсорбции ~ 1.7 eV. В заключение отметим, что продекларированный А.К. Геймом в [5] интерес к пустотам в 2D структурах действительно имеет место: см. [1], а также работу [6].

Ссылки

1. С.Ю. Давыдов, О.В. Посредник. Письма в ЖТФ (2025), **52** (1), 45.
2. Q. Sun, M. Dai, J. Hong, S. Feng, C. Wang, Z. Yuan. Int. J. Mol. Sci. (2025), **26**, 1709.
3. С.Ю. Давыдов, А.В. Зубов, А.А. Лебедев. Письма в ЖТФ (2019), **45** (9), 40.
4. С.Ю. Давыдов, А.А. Лебедев, О.В. Посредник. Элементарное введение в теорию наноситов. Изд-во «Лань», СПб (2014).
5. A.K. Geim. Nano Lett. (2021), **21**, 6356.
6. А.В. Савин, А.П. Клинов. ФТТ (2025), **67**, 2173.