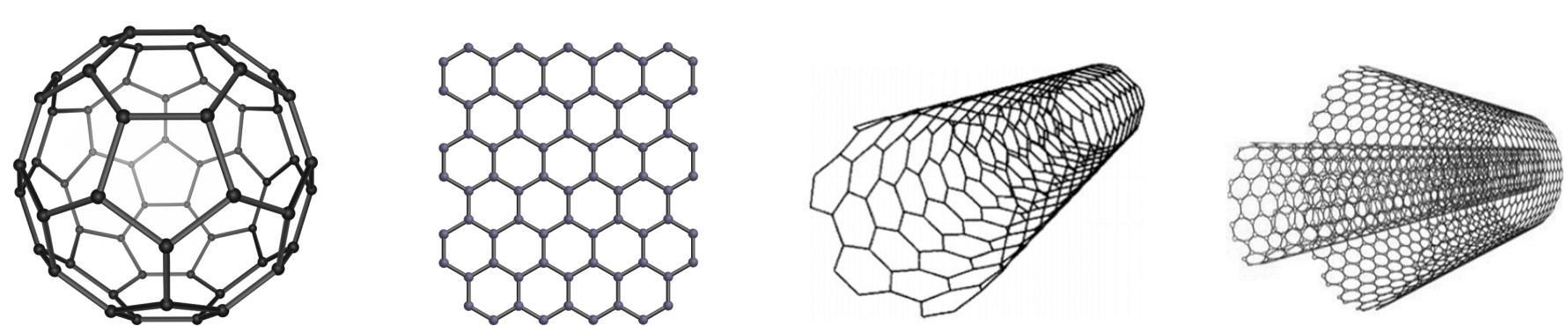


# МОДЕЛИРОВАНИЕ XAFS-СПЕКТРОВ УГЛЕРОДНЫХ НАНОСТРУКТУР НИЗКОЙ РАЗМЕРНОСТИ

П. А. Макаров, С. В. Некипелов, В. Н. Сивков

Физико-математический институт, ФИЦ Коми НЦ УрО РАН, Россия, Сыктывкар

## Введение



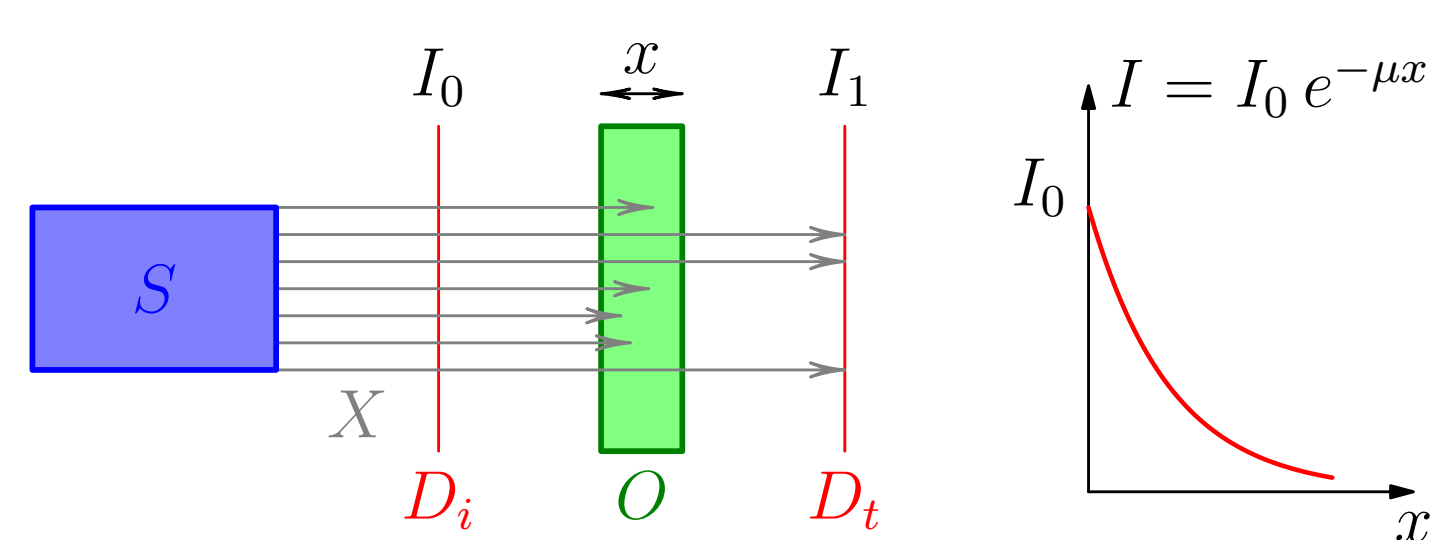
Самые известные углеродные наноматериалы

**Цель:** отработка методики использования пакетов Fullerene [1] и FDMNES [2] для моделирования XAFS-спектров углеродных наноструктур низкой размерности.

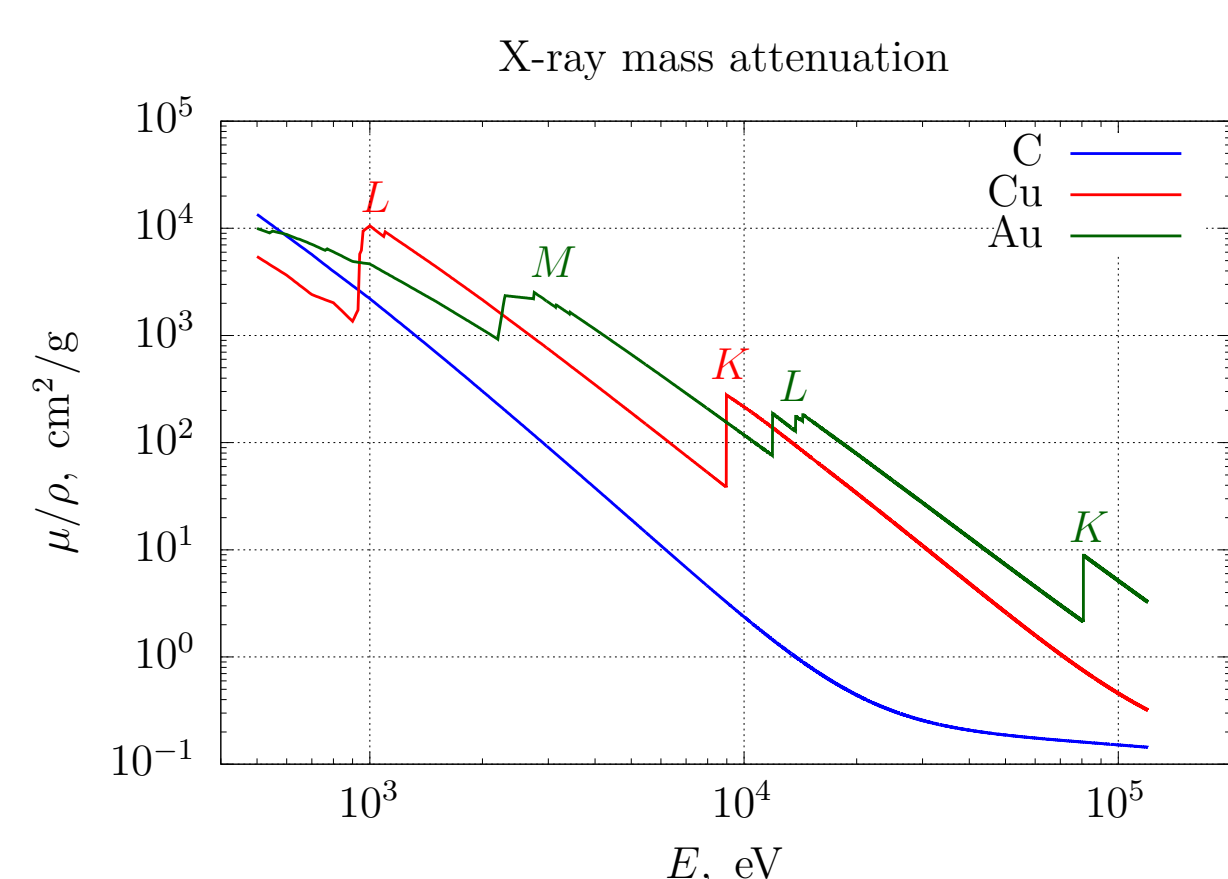
### Задачи:

- получение навыков конфигурации, использования и анализа результатов работы пакетов Fullerene и FDMNES;
- моделирование XAFS-спектров некоторых углеродсодержащих веществ: угарного CO и углекислого CO<sub>2</sub> газов, метана CH<sub>4</sub> и этана C<sub>2</sub>H<sub>6</sub>, ряда фуллеренов (C<sub>20</sub>, C<sub>32</sub>, C<sub>60</sub>, C<sub>74</sub>, C<sub>92</sub>), а также классических углеродных материалов: графита и алмаза;
- анализ полученных спектров.

## Основы XAS



$$\sigma \propto |\langle f | \hat{H} | i \rangle|^2, \quad \sigma = \frac{\mu}{\rho} \cdot \frac{M}{N_A}, \quad \frac{\mu}{\rho} \propto \frac{Z^4}{AE^3}$$



<https://xraypy.github.io/XrayDB>

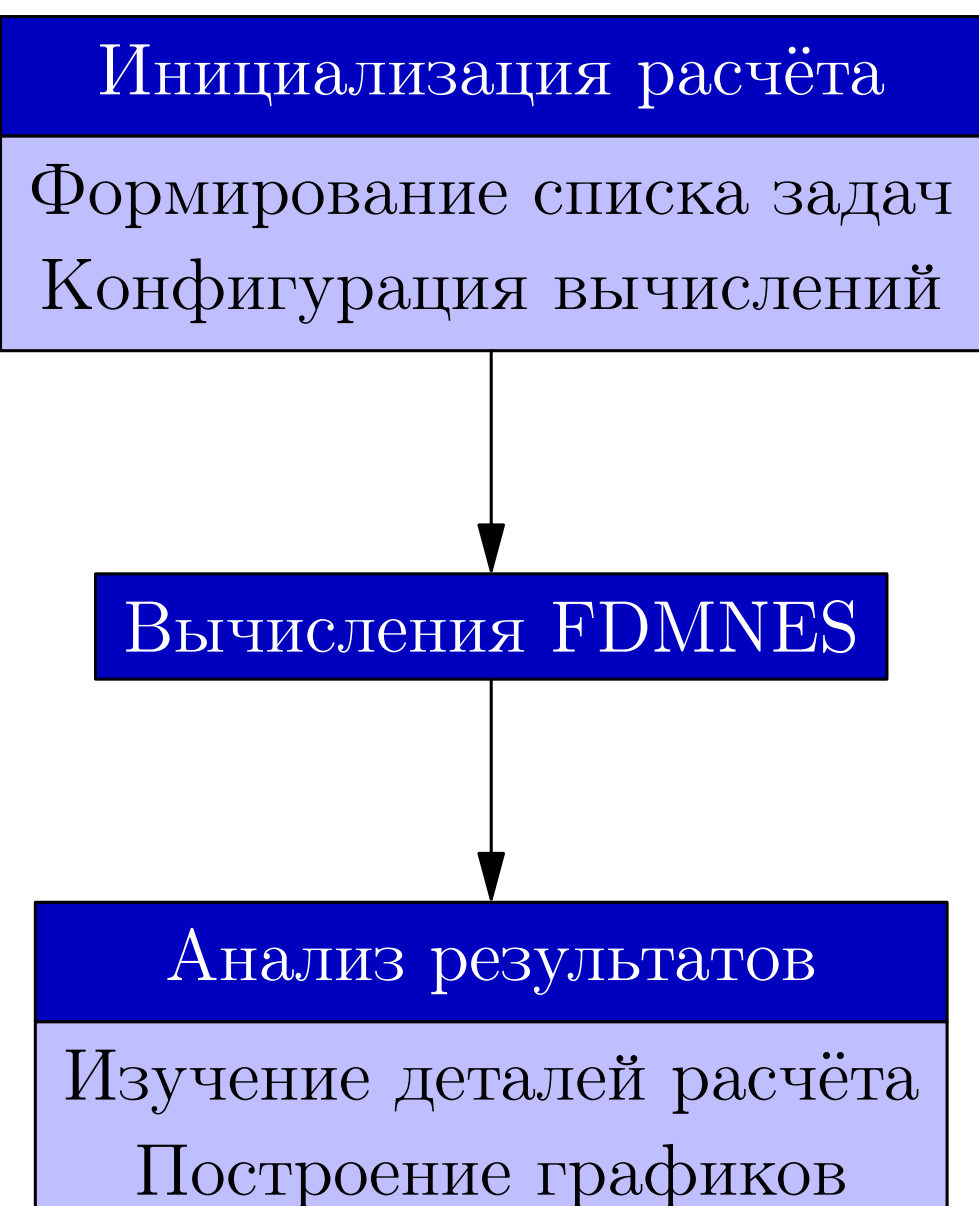
## FDMNES



Finite Difference Method Near Edge Structure

- Разработчики: исследовательская группа SIM (Surfaces, Interfaces and Nanostructures), Institute Néel, CNRS.
- Сайт проекта: <https://fdmnes.neel.cnrs.fr/>.
- Язык программирования: Fortran 2003.
- Параллелизация: MPI — Message Passing Interface.
- Доступность: свободное скачивание, компиляция и использование.
- Последнее обновление: 05.10.2023.

## Моделирование

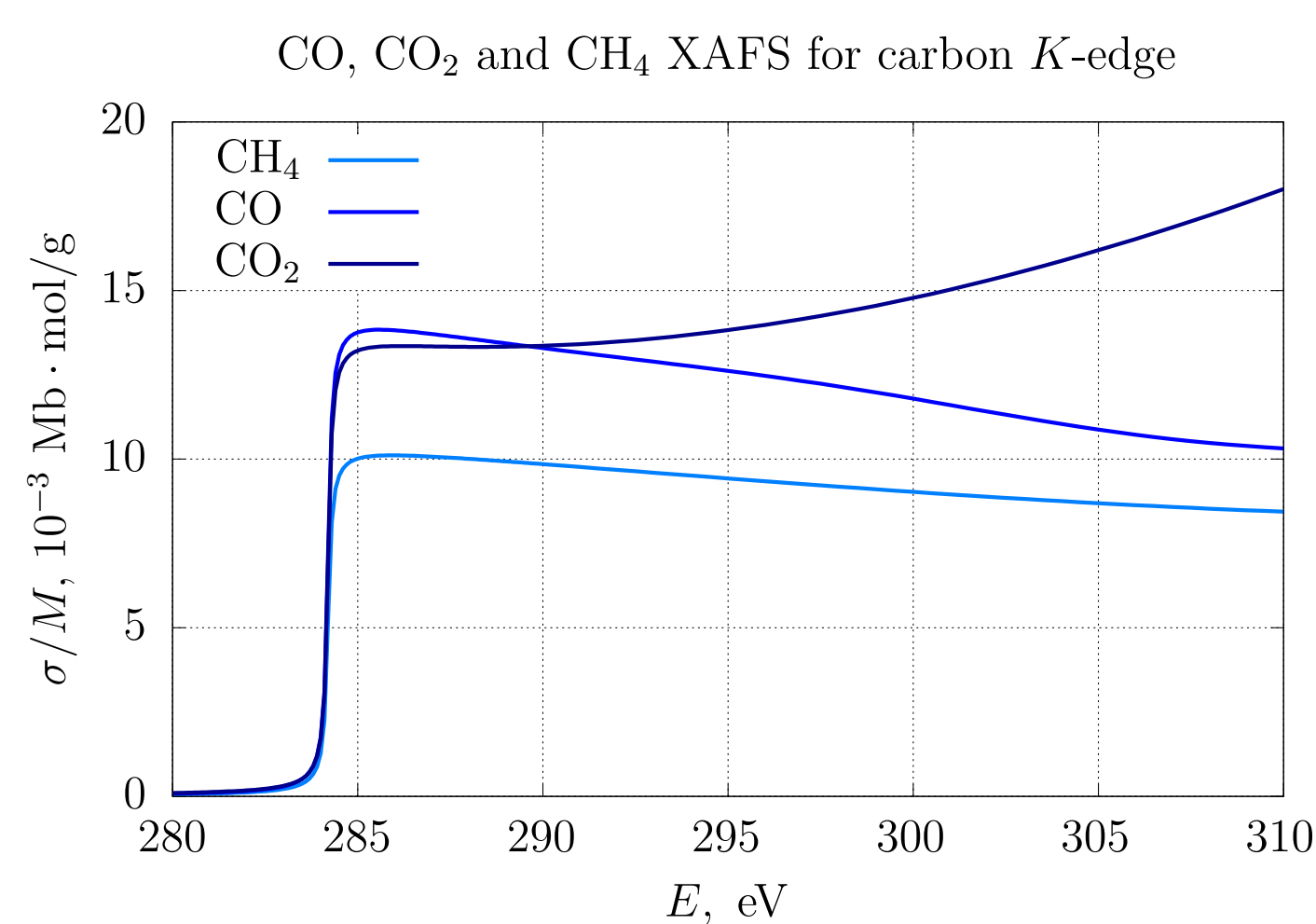


## Конфигурация

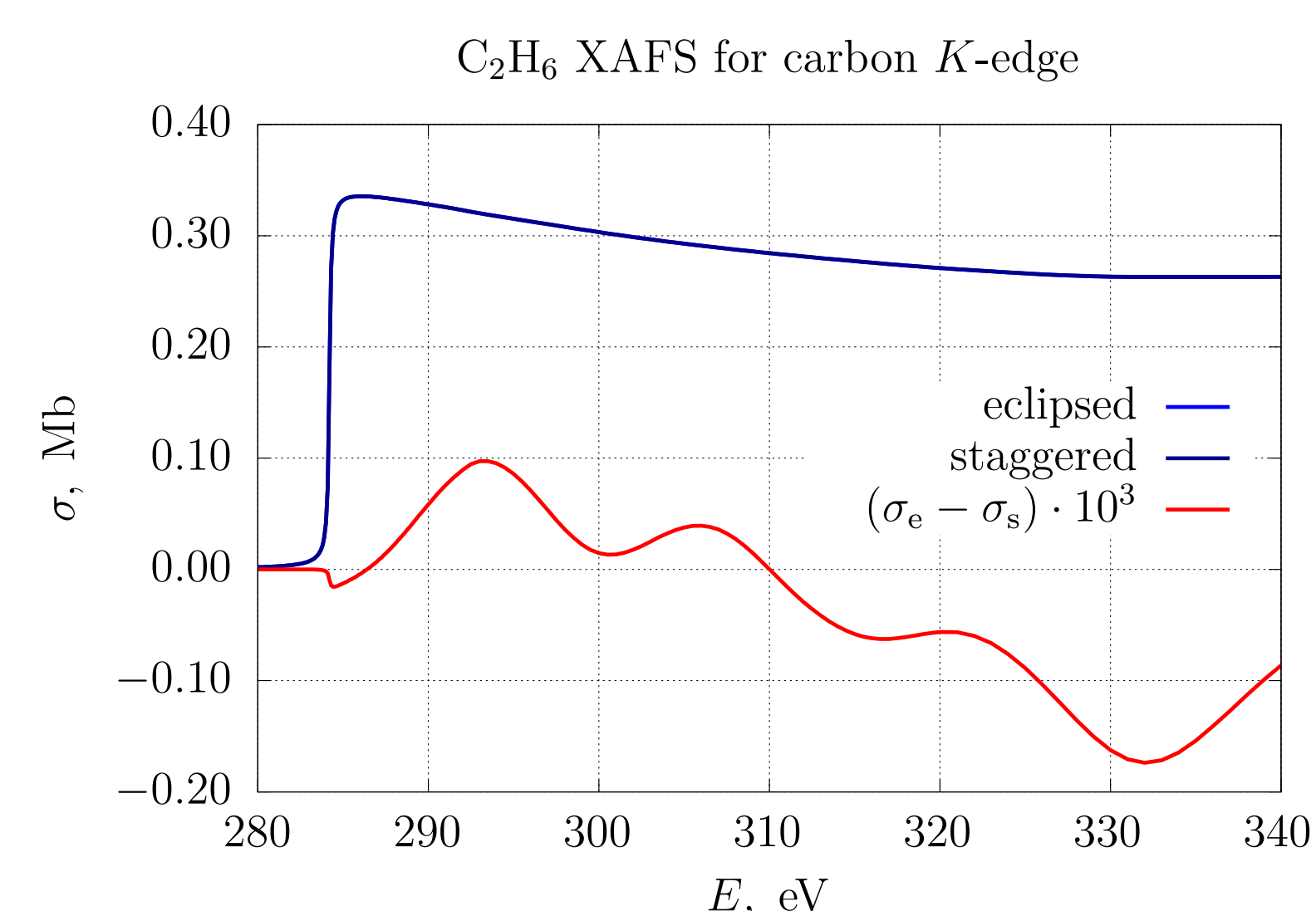
```

1 ! FDMNES indata file for the
2 carbon K-edge in CH4
3 File_out
4 Sim/Carbon/results/CH4
5 Enerpho
6 Range
7 280. 0.1 290. 0.5 320. 1.
8 335.
9 Radius
10 6.0
11 Molecule
12 1.087
13 6 0.0 0.0 0.0
14 1 1.0 0.0 0.0
15 1 1.0 109.5 0.0
16 1 1.0 109.5 120.0
17 1 1.0 109.5 240.0
18 Convolution
19 End
    
```

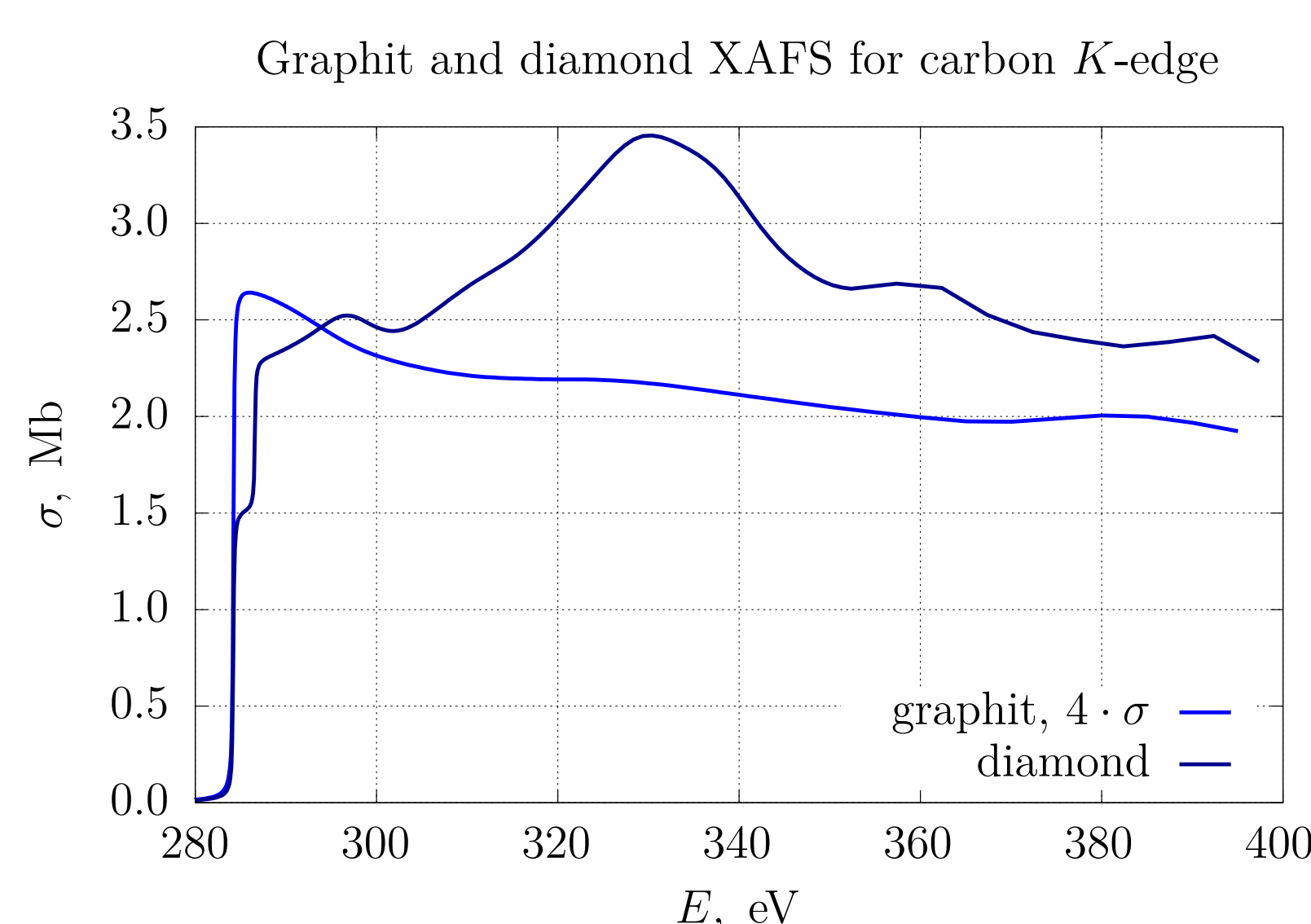
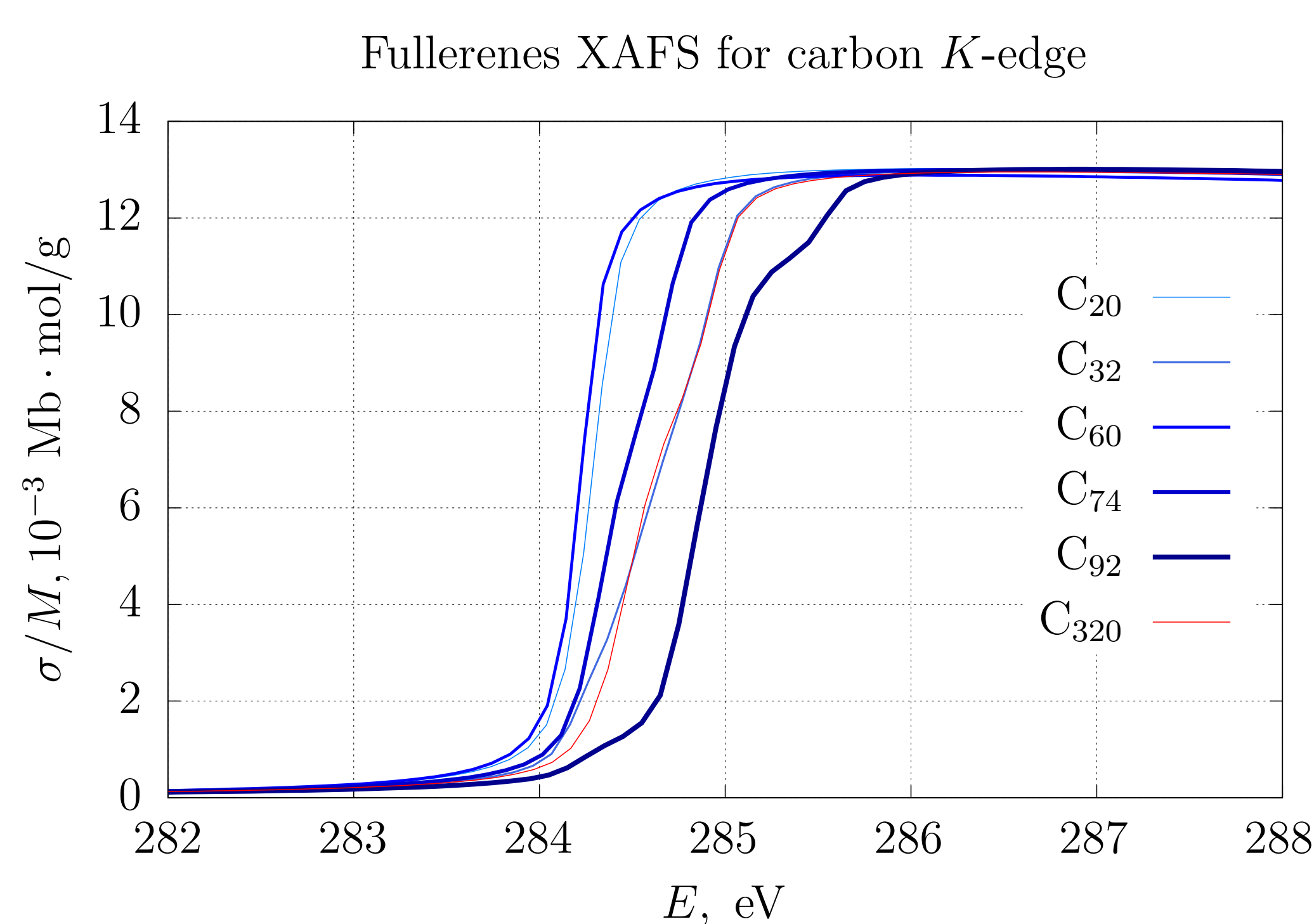
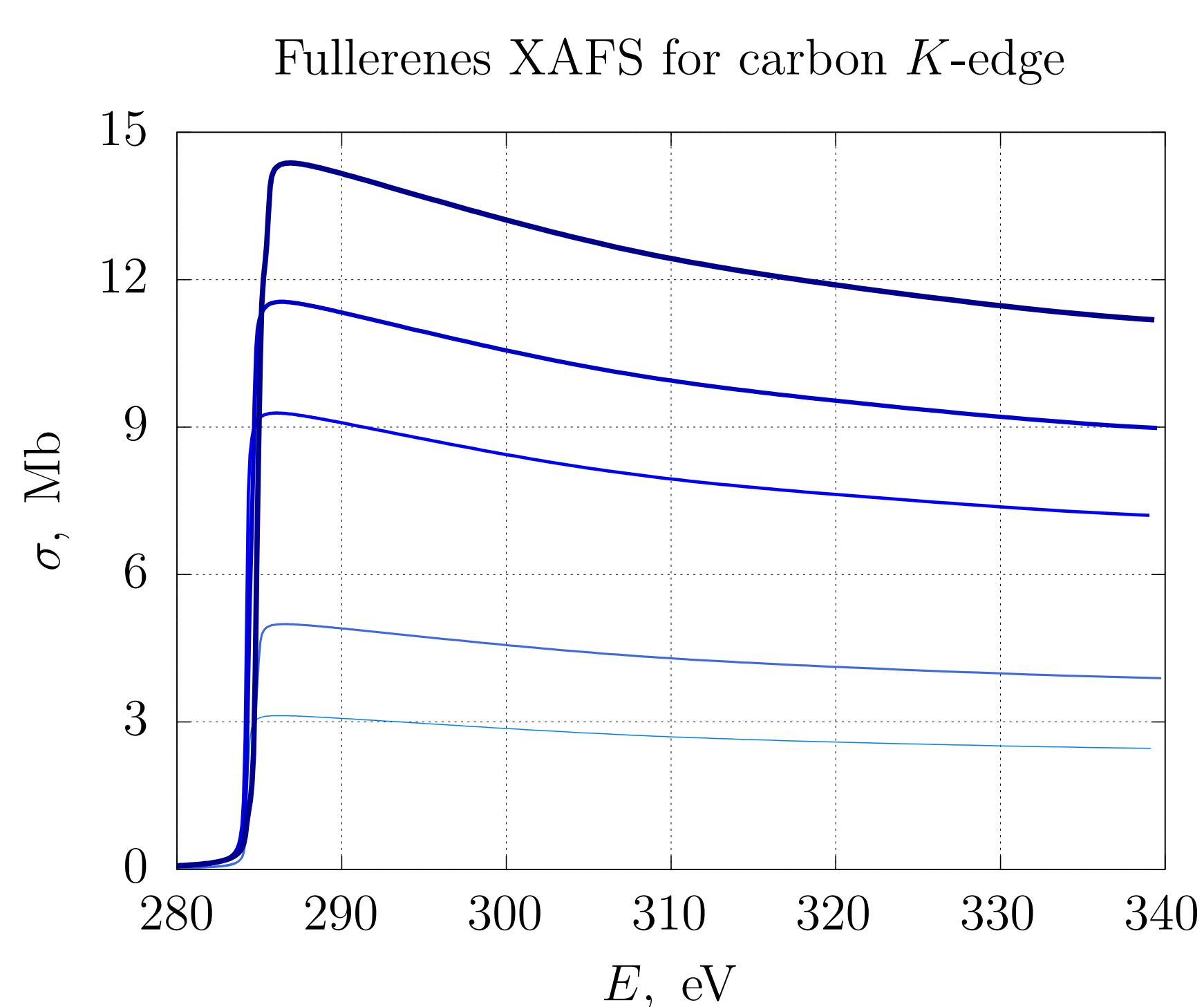
## Молекулы лёгких газов



## Цис- и транс-этан



## Основные результаты



## Заключение

В рамках данной работы выполнено моделирование XAFS-спектров нескольких 0D-мерных аллотропных модификаций углерода. В ходе этих исследований отработана методика совместного использования программного обеспечения с открытым исходным кодом Fullerene [1] и FDMNES [2]. Исследование выполнено при поддержке Министерства науки и высшего образования России в рамках соглашения № 075-15-2021-1351.

## Источники

- [1] P. Schwerdtfeger, L. Wirz, J. Avery. Program fullerene: a software package for constructing and analyzing structures of regular fullerenes // J. Comput. Chem., v. 34, 1508–1526 (2013).
- [2] O. Bunau, Y. Joly. Self-consistent aspects of X-ray absorption calculations // J. Phys.: Condens. Matter, v. 21, 345501 (2009).