

Growth of Ni nanoclusters on irradiated graphene: a molecular dynamics study

Por: [Valencia, FJ](#) (Valencia, F. J.)^[2,3,7]; [Hernandez-Vazquez, EE](#) (Hernandez-Vazquez, E. E.)^[4,5]; [Bringa, EM](#) (Bringa, E. M.)^[6]; [Moran-Lopez, JL](#) (Moran-Lopez, J. L.)^[4,5]; [Rogan, J](#) (Rogan, J.)^[2,3]; [Gonzalez, RI](#) (Gonzalez, R. I.)^[1,3]; [Munoz, F](#) (Munoz, F.)^[2,3]

[Ver ResearchID y ORCID](#)

PHYSICAL CHEMISTRY CHEMICAL PHYSICS

Volumen: 20

Número: 24

Páginas: 16347-16353

DOI: 10.1039/c7cp08642c

Fecha de publicación: JUN 28 2018

Tipo de documento: Article

[Ver impacto de la revista](#)

Abstract

We studied the soft landing of Ni atoms on a previously damaged graphene sheet by means of molecular dynamics simulations. We found a monotonic decrease of the cluster frequency as a function of its size, but few big clusters comprise an appreciable fraction of the total number of Ni atoms. The aggregation of Ni atoms is also modeled by means of a simple phenomenological model. The results are in clear contrast with the case of hard or energetic landing of metal atoms, where there is a tendency to form mono-disperse metal clusters. This behavior is attributed to the high diffusion of unattached Ni atoms, together with vacancies acting as capture centers. The findings of this work show that a simple study of the energetics of the system is not enough in the soft landing regime, where it is unavoidable to also consider the growth process of metal clusters.

Palabras clave

KeyWords Plus: [REACTIVE FORCE-FIELD](#); [TOTAL-ENERGY CALCULATIONS](#); [WAVE BASIS-SET](#); [METAL-CLUSTERS](#); [ADATOM ADSORPTION](#); [CARBON NANOTUBES](#); [SURFACE](#); [REAXFF](#); [DIFFUSION](#); [VACANCIES](#)

Información del autor

Dirección para petición de copias: Munoz, F (autor para petición de copias)

 Univ Chile, Fac Ciencias, Dept Fis, Santiago, Chile.

Dirección para petición de copias: Munoz, F (autor para petición de copias)

Ctr Desarrollo Nanociencia & Nanotecnologia CEDENN, Santiago, Chile.

Direcciones:

- + [1] Univ Mayor, Fac Ciencias, Ctr Nanotecnol Aplicada, Santiago, Chile
- + [2] Univ Chile, Fac Ciencias, Dept Fis, Santiago, Chile
- [3] Ctr Desarrollo Nanociencia & Nanotecnologia CEDENN, Santiago, Chile
- + [4] Univ Nacl Cuyo, CONICET, Mendoza, Argentina
- + [5] Univ Nacl Cuyo, Fac Ciencias Exactas & Nat, Mendoza, Argentina
- + [6] IPICYT, Adv Mat Dept, San Luis Potosi, San Luis Potosi, Mexico
- + [7] Univ Mayor, Fac Ciencias, Nucleo Matemat Fis & Estadist, Santiago, Chile

Direcciones de correo electrónico:fvmunoz@gmail.com

Financiación

Entidad financiadora	Número de concesión
Fondecyt (Chile)	1150806 1160639
Financiamiento Basal para Centros Científicos y Tecnológicos de Excelencia (Chile) through the Center for Development of Nanoscience and Nanotechnology (CEDENNA)	FB0807
CONACYT (Mexico)	288363
NLHPC	ECM-02
	PICT2014-0096
	SeCTyP- UNCuyo M025

[Ver texto de financiación](#)

Editorial

ROYAL SOC CHEMISTRY, THOMAS GRAHAM HOUSE, SCIENCE PARK, MILTON RD,
CAMBRIDGE CB4 0WF, CAMBS, ENGLAND

Información de la revista

- Impact Factor: [Journal Citation Reports](#)

Categorías / Clasificación

Áreas de investigación: Chemistry; Physics

Categorías de Web of Science: Chemistry, Physical; Physics, Atomic, Molecular & Chemical

Información del documento

Idioma:English

Número de acceso: WOS:000436032900004

ID de PubMed: 29683154

ISSN: 1463-9076

eISSN: 1463-9084