

Моделирование движения молекулы фуллерена C_{60} между плоскостями графена

М. М. Бухурова

В работе с использованием парного потенциала Леннарда–Джонса выведены формулы для потенциала и силы взаимодействия молекулы фуллерена C_{60} с двумя плоскостями графена (бислоя графена). Проведено численное моделирование движения молекулы фуллерена между плоскостями графена. Показано, что молекула фуллерена совершает колебательное движение, характер которого зависит от начальных условий и параметров взаимодействия. Полученные результаты представляют интерес для изучения процесса адсорбции молекул фуллерена в бислое графена.

Ключевые слова: потенциал Леннарда–Джонса, молекула фуллерена, бислойный графен, равновесное расстояние, колебательное движение.

Введение

Изучение адсорбционных свойств графена в настоящее время является актуальной задачей. Достаточно подробно вопросы физикохимии молекулярной адсорбции на графене освещены в обзоре [1]. Взаимодействие молекул фуллерена C_{60} с однослойным графеном рассматривалось в работах [2–7]. В работе [8] рассматривается адсорбция одиночного атома на поверхности бислоя графена с использованием гамильтониана Андерсона. Из анализа результатов перечисленных работ можно сделать вывод, что в данном случае имеет место физическая адсорбция, при которой ключевую роль играет взаимодействие Ван-дер-Ваальса.

Следует, однако, отметить, что в работах [2–7] представлены лишь численные результаты моделирования, при этом формула для потенциала взаимодействия «фуллерен-графен» в явном аналитическом виде в этих работах не была получена. В то же время в работе [9] в аналитическом виде вычислен потенциал взаимодействия молекулы фуллерена C_{60} с однослойным графеном. Представляет интерес в рамках подхода [9] рассмотреть и случай бислойного графена.

С практической точки зрения бислойный графен интересен тем, что он может являться элементом нанoeлектроники. В энергетическом спектре электронов бислоя, к которому приложено

напряжение (т. н. перестраиваемый бислой графена), имеется щель, ширина которой зависит от величины приложенного напряжения [10–12]. Это свойство делает бислойный графен перспективным для создания транзисторов нового типа, которые будут отличаться высоким быстродействием. Кроме того, управление шириной запрещенной зоны дает возможность применить бислойный графен в оптоэлектронике.

Следует также отметить, что в бислойном графене наблюдается дробный квантовый эффект Холла [13–15]. Таким образом, данный материал может успешно использоваться не только для практической нанoeлектроники, но и для изучения фундаментальных квантовых явлений в твердых телах.

Целью данной работы является моделирование системы «фуллерена C_{60} – бислойный графен». Такая система, в частности, может образовываться в процессе самосборки при синтезе углеродных наноструктур методом распыления графита под действием сильного электрического поля или лазерного излучения. В связи с этим, представляет интерес рассчитать потенциал взаимодействия в системе «фуллерен C_{60} – бислойный графен», вычислить траекторию движения молекулы внутри бислоя в зависимости от начальных условий и параметров задачи, а также определить минимально возможное расстояние между листами графена.

Постановка работы

Предполагается, что плоскости графена являются неподвижными, а молекула фуллерена на-

Бухурова Марета Мухамедовна, с.н.с., к.ф.-м.н.
Институт прикладной математики и автоматизации КБНЦ РАН.
Россия, 360000, г. Нальчик, ул. Шортанова, 89а.
E-mail: mareta.bukhurova@mail.ru

Статья поступила в редакцию 3 апреля 2018 г.

ходится между ними. Для расчета потенциала взаимодействия используется т. н. континуальное приближение, которое не учитывает атомную структуру взаимодействующих тел, но во многих случаях позволяет получать простые формулы в явном аналитическом виде. Применение данного

приближения в рассматриваемой нами задаче обосновывается возможным вращением молекулы фуллерена, которое естественным образом усредняет потенциал взаимодействия.

Потенциал взаимодействия молекулы фуллерена с графеном имеет вид [9]:

$$\Phi = \frac{2}{45} \pi n_s^2 r_0^3 R D \left\{ \left(\frac{r_0}{z-R} \right)^9 - \left(\frac{r_0}{z+R} \right)^9 - 15 \left[\left(\frac{r_0}{z-R} \right)^3 - \left(\frac{r_0}{z+R} \right)^3 \right] \right\}, \quad (1)$$

где $D = 3,202$ мэВ – глубина потенциальной ямы, $r_0 = 0,3985$ нм – равновесное расстояние между атомами, z – расстояние между графеном центром молекулы фуллерена, $R = 0,357$ нм – радиус молекулы фуллерена, $n_s = 3,746 \times 10^{19} \text{ м}^{-2}$ – поверхностная плотность атомов углерода в молекуле фуллерена и графене. Поверхностные плотности атомов углерода в молекуле фуллерена и в листе графена одинаковы. Формула (1) получается в результате интегрирования потенциала Леннарда–Джонса по

сферической поверхности молекулы фуллерена и бесконечной плоскости графена.

Поскольку молекула фуллерена находится между двумя плоскостями графена (см. рис. 1), то результирующий потенциал равен величине:

$$U_{x,d} = \Phi_{d-x} + \Phi_{d+x}, \quad (2)$$

где x – смещение молекулы фуллерена относительно центра щели. Тогда с учетом формул (1) и (2) для результирующего потенциала находим выражение:

$$U = \frac{2}{45} \pi n_s^2 r_0^3 R D \left\{ \left(\frac{r_0}{d-x-R} \right)^9 - \left(\frac{r_0}{d-x+R} \right)^9 - 15 \left[\left(\frac{r_0}{d-x-R} \right)^3 - \left(\frac{r_0}{d-x+R} \right)^3 \right] + \left(\frac{r_0}{d+x-R} \right)^9 - \left(\frac{r_0}{d+x+R} \right)^9 - 15 \left[\left(\frac{r_0}{d+x-R} \right)^3 - \left(\frac{r_0}{d+x+R} \right)^3 \right] \right\}, \quad (3)$$

где $2d$ – расстояние между плоскостями графена. Дифференцируя (3) по переменной x , получаем

формулу для консервативной силы, которая действует на молекулу фуллерена:

$$F = \frac{2}{5} \pi n_s^2 r_0^3 R D \left\{ \left(\frac{r_0}{d-x-R} \right)^{10} - \left(\frac{r_0}{d-x+R} \right)^{10} - 5 \left[\left(\frac{r_0}{d-x-R} \right)^4 - \left(\frac{r_0}{d-x+R} \right)^4 \right] + \left(\frac{r_0}{d+x-R} \right)^{10} - \left(\frac{r_0}{d+x+R} \right)^{10} - 5 \left[\left(\frac{r_0}{d+x-R} \right)^4 - \left(\frac{r_0}{d+x+R} \right)^4 \right] \right\}. \quad (4)$$

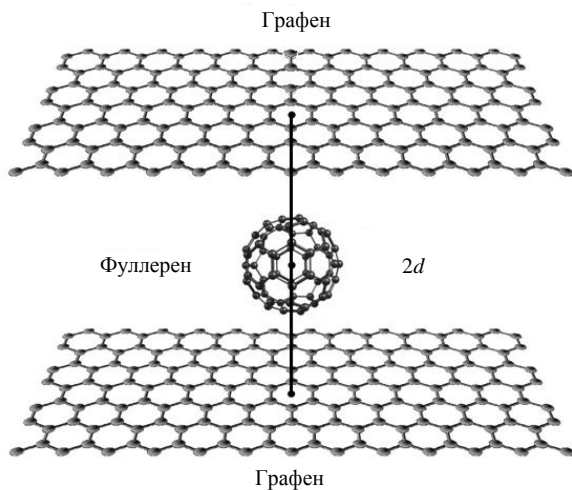


Рис. 1. Система «фуллерен – бислой графена».

Расчеты

График зависимости потенциальной энергии взаимодействия молекулы фуллерена, находящейся между плоскостями графена, показан на рис. 2. Чтобы определить минимальное расстояние между двумя плоскостями в бислойном графене с молекулой фуллерена внутри, необходимо решить уравнение $U'_d = 0$. Таким образом, приходим к следующему алгебраическому уравнению:

$$\frac{1}{5} \left[\left(\frac{r_0}{d+R} \right)^{10} - \left(\frac{r_0}{d-R} \right)^{10} \right] - \left(\frac{r_0}{d+R} \right)^4 + \left(\frac{r_0}{d-R} \right)^4 = 0. \quad (5)$$

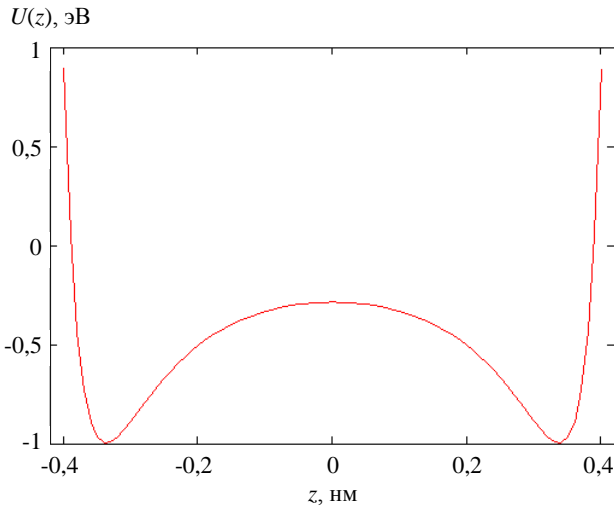


Рис. 2. Зависимость потенциальной энергии взаимодействия от расстояния для системы «фуллерен C₆₀ – бислой графена» при d = 1 нм.

Численное решение уравнения (5) дает значение d = 0,662 нм, что точно совпадает с равновесным расстоянием для системы «фуллерен-графен», найденным в работе [9]. Энергия связи фуллерена внутри бислойного графена равна –1,914 эВ.

С учетом (4) запишем уравнение движения молекулы фуллерена вместе с начальными условиями в безразмерном виде:

$$\frac{d^2y}{d\eta^2} + 2\alpha \frac{dy}{d\eta} = f \cdot y, \quad (6)$$

$$f \cdot y = y - y_0^{-10} - y - y_1^{-10} - 5 y - y_0^{-4} + 5 y - y_1^{-4} + y + y_1^{-10} - y + y_0^{-10} - 5 y + y_1^{-4} + 5 y + y_0^{-4},$$

$$y = x / r_0, \quad y_0 = d - R / r_0, \quad y_1 = d + R / r_0,$$

$$\eta = t / t_0, \quad \alpha = t_0 / \tau, \quad t_0 = \frac{1}{\pi n_s} \sqrt{\frac{5m}{2Rr_0D}},$$

где τ – время релаксации колебаний, m = 2×10⁻²⁶ кг – масса молекулы фуллерена, y₀ = 0,896 и t₀ = 0,22 пс – численные параметры. Для уравнения (6) решается задача Коши с условиями

$$y(0) = y_i, \quad y'(0) = v_i, \quad (7)$$

где y_i – смещение молекулы фуллерена относительно центра щели между плоскостями графена, v_i – начальная скорость молекулы фуллерена. Уравнение (6) с учетом условий (7) решалось численно методом Рунге-Кутты четвертого порядка с помощью программы MathCad.

Результаты моделирования при различных начальных условиях представлены на рис. 3 и 4. Молекула фуллерена в потенциальном поле графена совершает ангармонические колебания. Частота этих колебаний зависит от начальных данных. В случае, когда колебания молекулы при t = 0 начинаются вблизи одной из стенок бислоя, то через определенный промежуток времени она «сваливается» в потенциальную яму этой стенки и далее продолжает осциллирующее движение с небольшой амплитудой до полной остановки. Частота осциллирующего затухающего движения молекулы фуллерена около плоскости графена зависит также от начальной скорости молекулы. Если начальная скорость молекулы не равна нулю, то в зависимости от величины этой скорости возможны две ситуации: молекула сразу попадает в потенциальную яму вблизи плоскости графена (см. рис. 3) или молекула фуллерена совершает несколько осцилляций с большой амплитудой, а затем, теряя энергию, попадает в потенциальную яму вблизи какой-либо стенки (см. рис. 4).

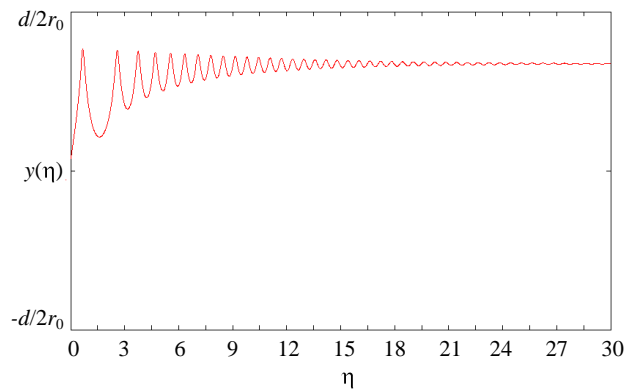


Рис. 3. Траектории движения молекулы фуллерена C₆₀ между плоскостями графена (y(0) = 0,1, y'(0) = 1).

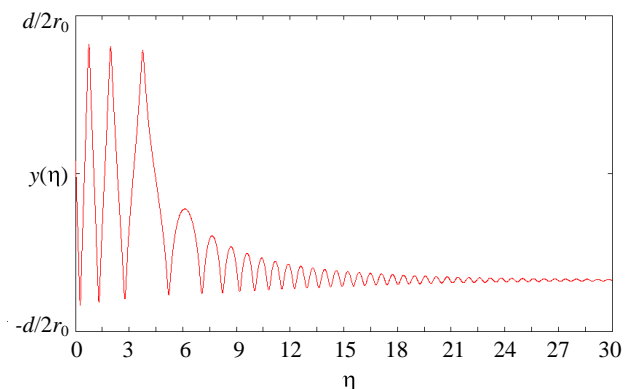


Рис. 4. Траектории движения молекулы фуллерена C₆₀ между плоскостями графена (y(0) = 0,1, y'(0) = -5).

Таким образом, если расстояние между плоскостями графена достаточно большое, то в промежутке между ними молекула фуллерена мо-

жет совершать колебания либо вблизи одной из стенок, либо отталкиваясь от двух стенок. Со временем молекула теряет энергию и закрепляется около одной из стенок. Падение молекулы на одну из стенок происходит вследствие того, что положение в центре щели отвечает максимуму потенциальной энергии (см. рис. 2), т. е. является неустойчивым. Если $d = 0,662$ нм, то молекула фуллерена оказывается плотно зажатой между двумя плоскостями графена. В этом случае получается равновесная сэндвич-структура, т. е. бислойный графен с молекулой фуллерена внутри. Представляет интерес теоретически исследовать электронные свойства данной системы, однако это является предметом отдельной работы.

Заключение

В работе с использованием парного потенциала Леннарда–Джонса выведены формулы для потенциала и силы взаимодействия молекулы фуллерена C_{60} с двумя плоскостями графена (бислой графена). Проведено численное моделирование движения молекулы фуллерена между плоскостями графена. Показано, что молекула фуллерена совершает колебательное движение, характер которого зависит от начальных условий и параметров взаимодействия.

Полученные результаты представляют интерес для изучения процесса адсорбции молекул фуллерена в бислое графена. Интересно также

теоретически исследовать электронные свойства данной системы, что может быть предметом отдельной работы.

ЛИТЕРАТУРА

1. Kong L., Enders A., Rahman T. S., Dowben P. A. // J. Phys.: Condens. Matter. 2014. Vol. 26. P. 443001.
2. Girifalco L. A., Hodak M., Lee R. S. // Phys. Rev. B. 2000. Vol. 62. P. 13104.
3. Ulbricht H., Moos G., Hertel T. // Phys. Rev. Lett. 2003. Vol. 90. No. 9. P. 095501.
4. Dappe Y. J., Ortega J., Flores F. // Phys. Rev. B. 2009. Vol. 79. P. 165409.
5. Yu D., Park K., Durstock M., Dai L. // J. Phys. Chem. Lett. 2011. Vol. 2. No. 10. P. 1113.
6. Svec M., Merino P., Dappe Y. J., et al. // Phys. Rev. B. 2012. Vol. 86. P. 121407.
7. Laref S., Asaduzzaman A. M., Beck W., et al. // Chem. Phys. Lett. 2013. Vol. 582. No. 4. P. 115.
8. Alisultanov Z. Z. // Semiconductors. 2013. Vol. 47. No. 7. P. 954.
9. Rekhviashvili S. Sh., Bukhurova M. M. // Protection of Metals and Physical Chemistry of Surfaces. 2017. Vol. 53. No. 6. P. 569.
10. Ohta T., Bostwick A., Seyller T., et al. // Science. 2016. Vol. 313. P. 951.
11. Castro E. V., Novoselov K. S., Morozov S. V., et al. // Phys. Rev. Lett. 2007. Vol. 99. P. 216802.
12. Schwierz F. // Nature Nanotechnology. 2010. Vol. 5. P. 487.
13. Maher P., Wang L., Gao Y., et al. // Science. 2014. Vol. 345. P. 61.
14. Kou A., Feldman B. E., Levin A. J., et al. // Science. 2014. Vol. 345. No. 6192. P. 55.
15. Li J. I. A., Tan C., Chen S., et al. // Science. 2017. Vol. 358. No. 6363. P. 648.

PACS: 81.05.ub; 81.07.De

Simulation for the fullerene C_{60} molecule motion between graphene sheets

M. M. Bukhurova

Institute of Applied Mathematics and Automation KBSC RAS
89a Shortanova ul., Nalchik, 360000, Russia
E-mail: mareta.bukhurova@mail.ru

Received April 3, 2018

In this work we derive a formula of potential energy and interaction force of the fullerene C_{60} molecule with two graphene (bilayer graphene) sheets involving the Lennard–Jones potential. A numerical simulation of the fullerene molecule motion between graphene sheets is carried out. We demonstrated the fullerene molecule is oscillating, and the character of oscillation depends upon the initial conditions and interaction parameters. The results obtained are of great interest in study of influence of fullerene molecules on adsorption properties in the graphene bilayer.

Keywords: Lennard–Jones potential, fullerene molecule, bilayer graphene, equilibrium distance, vibrational motion.

REFERENCES

1. L. Kong, A. Enders, T. S. Rahman, and P. A. Dowben, *J. Phys.: Condens. Matter.* **26**, 443001 (2014).
2. L. A. Girifalco, M. Hodak, and R. S. Lee, *Phys. Rev. B.* **62**, 13104 (2000).
3. H. Ulbricht, G. Moos, and T. Hertel, *Phys Rev Lett.* **90** (9), 095501 (2003).
4. Y. J. Dappe, J. Ortega, and F. Flores, *Phys. Rev. B.* **79**, 165409 (2009).
5. D. Yu, K. Park, M. Durstock, and L. Dai, *J. Phys. Chem. Lett.* **2** (10), 1113 (2011).
6. M. Svec, P. Merino, Y. J. Dappe, et al., *Phys. Rev. B.* **86**, 121407 (2012).
7. S. Laref, A. M. Asaduzzaman, W. Beck, et al. *Chem. Phys. Lett.* **582** (4), 115 (2013).
8. Z. Z. Alisultanov, *Semiconductors* **47** (7), 954 (2013).
9. S. Sh. Rekhviashvili and M. M. Bukhurova, *Protection of Metals and Physical Chemistry of Surfaces* **53** (6), 569 (2017).
10. T. Ohta, A. Bostwick, T. Seyller et al. *Science* **313**, 951 (2016).
11. E. V. Castro, K. S. Novoselov, S. V. Morozov et al. *Phys Rev Lett.* **99**, 216802 (2007).
12. F. Schwierz, *Nature Nanotechnology* **5**, 487 (2010).
13. P. Maher, L. Wang, Y. Gao, et al. *Science* **345**, 61 (2014).
14. A. Kou, B. E. Feldman, A. J. Levin et al. *Science* **345** (6192), 55 (2014).
15. J. I. A. Li, C. Tan, S. Chen, et al. *Science* **358** (6363), 648 (2017).