Uzbek Journal of Physics

Vol.21(№5) 2019 PP.280-282

НЕВАЛЕНТНОЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ НИЗШИХ ФУЛЛЕРЕНОВ С ГРАФЕНОМ

В.Г. Стельмах[1], И.Д. Ядгаров[1], А.Н. Улукмурадов[2], У.Б. Улжаев[2]

[1]Институт ионно-плазменных и лазерных технологий АН РУз, Ташкент, Узбекистан, ishmuminyadgarov@gmail.com

[2]Ташкентский институт текстильной и легкой промышленности, Ташкент, Узбекистан

(Получена 18.04.2019)

Компьютер модели асосида нуқсонсиз графен билан паст фуллеренларнинг C_n (n=20, 24, 26, 28, 30, 32, 36, 50, 60) ўзаро таъсири тадқиқ этилди. Фуллеренлардаги атомлар сонининг адсорбция энергиясига боғланиши тахлил қилинди ва фуллеренларнинг турғун оралиқдаги адсорбция энергиялари олинди.

Методами компьютерного моделирования исследовано невалентное взаимодействие фуллеренов C_n (n=20, 24, 26, 28, 30, 32, 36, 50, 60) с бездефектным графеном. Были получены энергии адсорбции, равновесные расстояния фуллеренов и проанализированы зависимости этих величин от количества атомов в этих фуллеренах.

The nonvalent interaction of fullerenes C_n (n = 20, 24, 26, 28, 30, 32, 36, 50, 60) with defect-free graphene has been studied using computer simulation methods. The adsorption energies and equilibrium distances of these fullerenes were obtained and the dependences of these quantities on the number of atoms in these fullerenes were analyzed.

В общем виде молекула фуллерена, состоящая из атомов углерода, имеет формулу C_{20+2m}, где $20+2m$ – число атомов углерода в молекуле фуллерена, m – натуральное число. В отличие от других кластеров углерода, грани фуллеренов, имеющие форму шести- или пятиугольников, образуют замкнутую объемную поверхность, близкую к шароподобной или эллипсоидальной. В наименьшем фуллерене C_{20} связи C–C образуют только правильные пятиугольники, в других фуллеренах присутствуют также шестиугольники, например, в самом распространенном фуллерене C_{60} связи C–C образуют 20 шестиугольников и 12 пятиугольников. Каждый атом углерода в молекуле фуллерена окружен тремя соседями, с двумя из которых он связан простой ковалентной связью, а с третьим двойной.

Бездефектный графен является плоской углеродной структурой [1], состоящей только из шестиугольников, похожих на шестиугольники фуллерена. С графеном могут взаимодействовать углеродные атомы, димеры и тримеры [2-4], молекулы CH_4 и CO_2 [5] и др. В работе [6] компьютерным моделированием *ab-initio* методом были рассмотрены разные случаи взаимодействия фуллерена C_{60} с поверхностью графена, в том числе имеющего вакансии и другие дефекты.

В настоящей работе посредством компьютерного моделирования в рамках классической молекулярной динамики рассматривается невалентное взаимодействие с бездефектным графеном фуллеренов C_n (n=20, 24, 26, 28, 30, 32, 36, 50, 60), которые в дальнейшем мы условно называем низшими фуллеренами.

Сначала методом минимизации энергии с использованием потенциала Бреннера второго поколения (REBO), который хорошо описывает углеродные

структуры [7], были построены компьютерные модели одиночных бездефектных низших фуллеренов. Затем строилась компьютерная модель одиночного бездефектного графена. Для этого был использован прямоугольный участок графена, состоящий из 112 атомов углерода, применялся тот же метод минимизации энергии с потенциалом Бреннера и с наложением периодических условий на граничные атомы; подробности и обоснование такой модели графена можно найти в работе [8].

Затем методом «заморозки» смоделировали невалентное взаимодействие фуллеренов с графеном, для этого было добавлено взаимодействие Леннарда-Джонсона между атомами фуллерена C_n и атомами графена, согласно потенциалу взаимодействия

$$V(r) = D[(r_0 / r)^{12} - 2(r_0 / r)^6], \quad (1)$$

где параметры D = 0.003202 эВ, r_0 = 3.985 Å использованы в аналитических расчетах в [10], r – расстояние между одним из атомов фуллерена и одним из атомов графена. Анализ результатов моделирования позволил определить зависимости энергии адсорбции E_{ads} и равновесного расстояния R_0 низших фуллеренов от количества атомов в фуллерене (см. рис. 1 и 2).

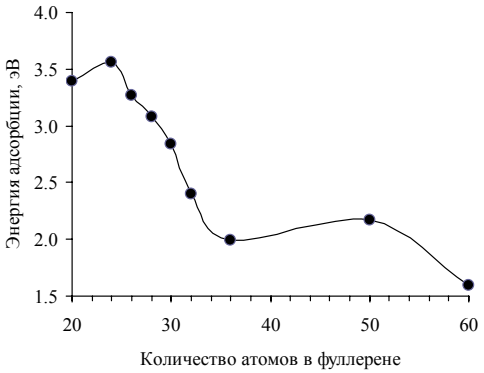


Рис. 1. Зависимость энергии адсорбции фуллерена на графен от количества атомов в фуллерене.

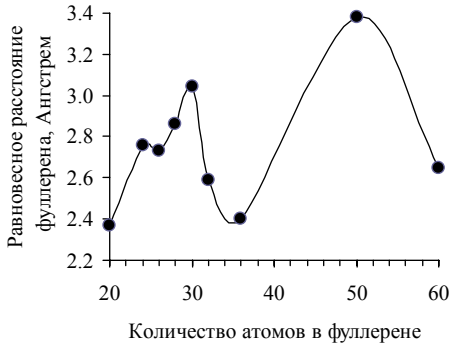


Рис. 2. Зависимость равновесного расстояния фуллерена от количества атомов в фуллерене.

Зависимости, показанные на рис. 1 и 2, можно аппроксимировать линейными функциями $y(n)=an+b$ при малых n, величины a и b приведены в табл. 1.

Таблица 1. Величины a и b при линейной аппроксимации $y(n)=an+b$ зависимостей E_{ads} и R_0 от количества атомов n в фуллерене.

Аппроксимируемая физическая величина	a	b	n	Достоверность аппроксимации
E_{ads}, эВ	–0.13, эВ	6.75, эВ	24, 36	0.988
R_0, Å	0.06, Å	1.17, Å	20, 30	0.930

Отметим, что равновесное расстояние R_0, определяемое как расстояние, отсчитываемое от нижней точки на каркасе фуллерена до плоскости графена, меньше расстояния $R_{\min}$ – наименьшего расстояния между атомами фуллерена и

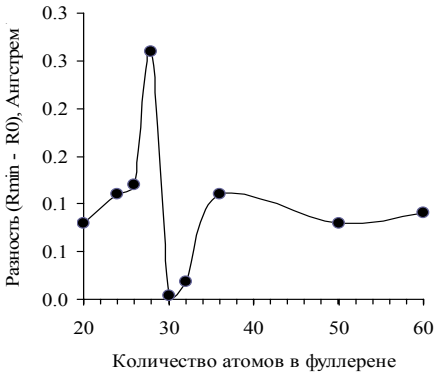


Рис. 3. Зависимость разности (R_{min}–R_0) от количества атомов в фуллерене.

графена. Зависимость разности (R_{min}–R_0) от количества атомов n в фуллерене показана на рис. 3. Сложный характер этой зависимости обусловлен тем, что форма низшего фуллерена отклоняется от сферической нерегулярным образом при разном количестве атомов в фуллерене. Так как из низших фуллеренов фуллерен C_{60} является наиболее стабильным, массовым в получении и первым из всех фуллеренов, обнаруженных экспериментально, то в заключение мы приведем в табл. 2 полученные нами и другими авторами значения энергий адсорбции и равновесных расстояний для случая невалентного взаимодействия фуллерена C_{60} с бездефектным графеном.

Таблица 2. Параметры взаимодействия фуллерена C_{60} с графеном.

Энергия адсорбции, эВ	Равновесное расстояние, Å	Работа
0.738	3.25	[11]
0.796	2.85	[12]
1.007–1.019	2.7–3.6	[13]
0.09–3.19	1.55–4.11	[6]
0.957	3.05	[10]
1.597	2.65	Наст. работа

Работа выполнена в рамках гранта ОТ-Ф2-46 фундаментальных исследований АН РУз.

ЛИТЕРАТУРА

1. A.K. Geim, K.S. Novoselov, Nature Mater. **6**, 183 (2007).
2. O. Lehtinen, N. Vats, G. Algara-Siller, P. Knyrim, U. Kaiser, Nano Lett. **15** (1), 235 (2015).
3. А.А. Джурахалов, В.Г. Стельмах, Н.Ю. Тураев, И.Д. Ядгаров, Узбек. физич. журн. **17**, №6, 400 (2015).
4. А.А. Джурахалов, Н.Ю. Тураев, В.Г. Стельмах, И.Д. Ядгаров, ДАН РУз №2, 13 (2016).
5. B.C. Wood, Sh.Y. Bhide, D. Dutta, V.S. Kandaga, A.D. Pathak, J. of Chemical Physics **137**, 054702 (2012).
6. S. Laref, A.M. Asaduzzaman, W. Beck, P.A. Deymier, K. Runge, L. Adamowicz, K. Muralidharan, Chemical Physics Letters **582**, 115 (2013).
7. D.W. Brenner, O.A. Shenderova, J.A. Harrison, S.J. Stuart, B. Ni, S.B. Sinnot, J. Phys: Condens. Matter. **14**, 783 (2002).
8. A.A. Dzhurakhalov, F.M. Peeters, Carbon **49**, 3258 (2011).
9. H. Ulbricht, G. Moos, T. Hertel, Phys. Rev. Lett. **90**, 095501 (2003).
10. S.S. Rechviashvili, M.M. Bukhurova, Prot. Met. Phys. Chem. Surf. **53** (6), 967 (2017).
11. L.A. Girifalco, M. Hodak, R.S. Lee. Phys. Rev. B **62**, 13104 (2000).
12. Y.J. Dappe, J. Ortega, F. Flores. Phys. Rev. B **79**, 165409 (2009).
13. M. Svec, P. Merino, Y.J. Dappe, C. González, E. Abad, P. Jelínek, J.A. Martín-Gago, Phys. Rev. B **86**, 121407 (2012).