

06.1

## Равновесные параметры бислойного графена, заполненного молекулами фуллерена C<sub>60</sub>

© С.Ш. Рехвиашвили, М.М. Бухурова

Институт прикладной математики и автоматизации КБНЦ РАН, Нальчик, Россия  
E-mail: rsergo@mail.ru

Поступило в Редакцию 15 декабря 2020 г.

В окончательной редакции 15 декабря 2020 г.

Принято к публикации 10 января 2021 г.

Рассчитаны толщина и удельная энергия когезии сэндвич-структуры в виде бислойного графена с плотноупакованными молекулами C<sub>60</sub> внутри. Полученные значения параметров (1.32 nm и 0.358 J/m<sup>2</sup>) согласуются с известными экспериментальными данными по гибридным углеродным наноструктурам и графиту.

**Ключевые слова:** бислойный графен, фуллерены, сэндвич-структура, межатомные взаимодействия, равновесные параметры.

DOI: 10.21883/PJTF.2021.08.50847.18655

В экспериментальных [1–3] и теоретических [4–8] работах изучались свойства такого гибридного углеродного наноматериала, как бислойный графен с молекулами фуллерена C<sub>60</sub> внутри. Достаточно много современных сведений о различных фуллерен-графеновых структурах представлено в обзоре [9]. Отметим, что в качестве методов получения сэндвич-структур, состоящих из графеновых листов и молекул фуллерена, используются термическое испарение, интеркалирование и химические реакции. Основным инструментом теории уже традиционно является компьютерное моделирование с применением методов молекулярной динамики и функционала электронной плотности.

В настоящей работе предлагается аналитический метод расчета сэндвич-структуры на основе бислойного графена и молекул фуллерена C<sub>60</sub>. Метод основан на континуальном приближении для потенциалов межатомного взаимодействия. Суть заключается в усреднении парного межатомного потенциала по поверхностям и объемам взаимодействующих компонентов. Такое усреднение представляется вполне оправданным, так как молекулы C<sub>60</sub> в межплоскостном пространстве могут быть ориентированы случайным образом по вращательным степеням свободы (см. [1]). Данный метод использовался нами в [10,11] для расчета систем, содержащих углеродные нанотрубки, фуллерены и нанолуковицы.

Будем рассматривать плотноупакованный монослой молекул фуллерена C<sub>60</sub>, который находится между двумя идеальными листами графена. Слоевая концентрация молекул равна  $2/(\sqrt{3}a^2)$ , где  $a = 1.01$  nm — расстояние между центрами соседних молекул. Предполагается, что в системе отсутствуют какие-либо деформации. В качестве парного потенциала воспользуемся формулой Леннарда–Джонса, которую запишем в виде

$$\phi(r) = D \left[ \left( \frac{r_0}{r} \right)^{12} - 2 \left( \frac{r_0}{r} \right)^6 \right], \quad (1)$$

где  $D = 3.202$  eV и  $r_0 = 0.3985$  nm — глубина потенциальной ямы и равновесное расстояние для двух атомов углерода. Численные значения параметров потенциала взяты из работы [12], в которой методом молекулярной динамики изучались свойства смеси молекул фуллерена с монооксидом углерода. Удельная энергия графен–графен есть

$$W_1(z) = 2\pi n_s^2 \int_z^\infty \phi(r) r dr, \quad (2)$$

где  $z$  — расстояние между двумя плоскостями графена,  $n_s = 3.82 \cdot 10^{19}$  m<sup>-2</sup> — поверхностная плотность атомов графена. После подстановки (1) в (2) и интегрирования получаем

$$W_1(z) = \pi n_s^2 D r_0^2 \left[ \frac{1}{5} \left( \frac{r_0}{z} \right)^{10} - \left( \frac{r_0}{z} \right)^4 \right]. \quad (3)$$

Из условия равновесия  $dW_1(z)/dz = 0$  при  $z = z_0$  находим основные параметры бислойного графена — равновесное межплоскостное расстояние и удельную энергию когезии:

$$z_0 = \frac{r_0}{\sqrt[5]{2}}, \quad W_G = -W_1(z_0) = \frac{6\pi D (n_s z_0)^2}{5}. \quad (4)$$

Учитывая численные значения параметров парного потенциала, получаем  $z_0 = 0.355$  nm и  $W_G = 0.356$  J/m<sup>2</sup>. Значение параметра  $z_0$  почти совпадает с межплоскостным расстоянием в графите 0.35 nm; удельная энергия когезии хорошо согласуется с экспериментальным значением удельной энергии скола графита  $0.37 \pm 0.01$  J/m<sup>2</sup> [13]. Данные оценки позволяют сделать заключение о надежности выбранных численных значений параметров потенциала (1).

Чтобы найти удельную энергию взаимодействия слоя молекул C<sub>60</sub> с графеном, требуется усреднить парный

потенциал по сферической поверхности молекулы и бесконечной плоскости. Это приводит к общему выражению вида

$$W_2(z) = \frac{120\pi n_s}{\sqrt{3}a^2} \int_z^\infty \left\{ \int_{-1}^1 \phi\left(\sqrt{r^2 + R^2 + 2rRx}\right) dx \right\} r dr, \quad (5)$$

где  $z$  — расстояние от центра молекул фуллерена до плоскости графена,  $R = 0.355$  nm — радиус молекулы фуллерена C<sub>60</sub>. Вычисление (5) с учетом (1) дает

$$W_2(z) = \frac{4\sqrt{3}\pi n_s r_0^3 D}{9Ra^2} \left\{ \left(\frac{r_0}{z-R}\right)^9 - \left(\frac{r_0}{z+R}\right)^9 - 15 \left[ \left(\frac{r_0}{z-R}\right)^3 - \left(\frac{r_0}{z+R}\right)^3 \right] \right\}. \quad (6)$$

Формулы (3) и (6) позволяют определить равновесную конфигурацию рассматриваемой сэндвич-структуры.

В аддитивном приближении полная удельная энергия системы равна

$$W(z) = W_1(2z) + 2W_2(z). \quad (7)$$

Условие равновесия  $dW(z)/dz = 0$  при  $z = z_0$  с учетом (3), (6) и (7) сводится к нелинейному уравнению

$$F\left(5, 2, \frac{r_0}{2z_0}\right) + C \left[ F\left(4, 5, \frac{r_0}{z_0 - R}\right) - F\left(4, 5, \frac{r_0}{z_0 + R}\right) \right] = 0, \quad (8)$$

$$F(n, m, y) = y^n (m - y^6),$$

$$C = \frac{2\sqrt{3}r_0}{Ra^2 n_s} = 0.1.$$

Уравнение (8) решалось итерационным методом секущих с точностью до трех знаков после запятой. Вычисленные равновесные параметры наноструктуры: толщина  $d = 2z_0 = 1.32$  nm; удельная энергия когезии  $W_{GF} = -W(z_0) = 0.358$  J/m<sup>2</sup>. Под когезией в данном случае нами понимается взаимное сцепление составных частей наноструктуры — двух листов графена и слоя молекул C<sub>60</sub>. Значение  $d$  согласуется с экспериментальными данными из работы [3], по которым толщина бислойного оксида графена, заполненного молекулами фуллерена, находится в интервале 0.91–1.56 nm. Как и в случае простого бислойного графена, удельная энергия когезии здесь оказывается близкой по своему значению к удельной энергии скола графита.

Таким образом, на основании данных настоящей работы приходим к нетривиальным выводам: 1) несмотря на существенное различие в толщине (почти в 4 раза), удельная энергия когезии бислойного графена с плотноупакованным слоем молекул фуллерена C<sub>60</sub> внутри

практически равна удельной энергии когезии простого бислойного графена ( $W_{GF} \approx W_G$ ); 2) радиус молекулы фуллерена C<sub>60</sub> и межплоскостные расстояния в графите и простом бислойном графене с высокой точностью совпадают друг с другом.

## Конфликт интересов

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

## Список литературы

- [1] M. Ishikawa, S. Kamiya, S. Yoshimoto, M. Suzuki, D. Kuwahara, N. Sasaki, K. Miura, J. Nanomater., **2010**, 891514 (2010). DOI: 10.1155/2010/891514
- [2] R. Mirzayev, K. Mustonen, M.R.A. Monazam, A. Mittelberger, T.J. Pennycook, C. Mangler, T. Susi, J. Kotakoski, J.C. Meyer, Sci. Adv., **3** (6), e1700176 (2017). DOI: 10.1126/sciadv.1700176
- [3] X. Tang, Y. Qu, Sh. Deng, Y. Tan, Q. Zhang, Q. Liu, J. Mater. Chem. A, **6** (45), 22590 (2018). DOI: 10.1039/C8TA08261H
- [4] M. Kirca, Composites B, **79**, 513 (2015). DOI: 10.1016/j.compositesb.2015.04.050
- [5] Z. Ozturk, C. Baykasoglu, M. Kirca, Int. J. Hydrogen Energy, **41** (15), 6403 (2016). DOI: 10.1016/j.ijhydene.2016.03.042
- [6] J.M. Devi, Bull. Mater. Sci., **42** (2), 75 (2019). DOI: 10.1007/s12034-019-1753-0
- [7] D. Mao, X. Wang, G. Zhou, L. Chen, J. Chen, S. Zeng, J. Mol. Model., **26** (7), 166 (2020). DOI: 10.1007/s00894-020-04417-1
- [8] А.А. Артюх, Л.А. Чернозатонский, Письма в ЖЭТФ, **111** (2), 93 (2020). DOI: 10.1134/S0021364020020058
- [9] M. Chen, R. Guan, Sh. Yang, Adv. Sci., **6** (1), 1800941 (2019). DOI: 10.1002/advs.201800941
- [10] С.Ш. Рехвишвили, М.М. Бухурова, Письма в ЖТФ, **44** (23), 24 (2018). DOI: 10.1134/S1063785018120349
- [11] С.Ш. Рехвишвили, М.М. Бухурова, Письма в ЖТФ, **45** (12), 9 (2019). DOI: 10.1134/S1063785019060294
- [12] S. Patucha, Z. Gburski, J. Biesiada, J. Mol. Struct., **704** (1-3), 269 (2004). DOI: 10.1016/j.molstruc.2004.02.044
- [13] W. Wang, S. Dai, X. Li, J. Yang, D.J. Srolovitz, Q. Zheng, Nature Commun., **6**, 7853 (2015). DOI: 10.1038/ncomms8853