

DOI: 10.26117/2079-6641-2019-28-3-58-64

ФИЗИКА

УДК 541.183

ПОТЕНЦИАЛЫ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ МОЛЕКУЛЫ ФУЛЛЕРЕНА C₆₀ И УГЛЕРОДНОЙ НАНОЧАСТИЦЫ С ТОЛСТОЙ ГРАФИТОВОЙ ПЛАСТИНОЙ

М. М. Бухурова

Институт прикладной математики и автоматизации – филиал Федерального государственного бюджетного научного учреждения "Федеральный научный центр "Кабардино-Балкарский научный центр РАН", 360000, Кабардино-Балкарская республика, г. Нальчик, ул. Шортанова, 89 А

E-mail: mareta.bukhurova@mail.ru

С использованием парного потенциала Леннарда-Джонса выведены аналитические выражения для потенциалов и сил взаимодействия молекулы фуллерена C₆₀ и углеродной наночастицы с толстой графитовой пластиной. Проведены численные расчеты потенциалов взаимодействия и равновесных параметров взаимодействия молекулы фуллерена и углеродной наночастицы с образцом.

Ключевые слова: потенциал Леннарда-Джонса, молекула фуллерена, графитовая пластина, углеродные наночастицы, равновесное расстояние

© Бухурова М.М., 2019

Введение

За последние 20 лет нанотехнологии внесли значительный вклад в развитие многих областей физики, химии и медицины. Применение углеродных наноструктур для создания конструкционных, электротехнических и полупроводниковых материалов для интегральной электроники является одним из перспективных направлений, над которым работают во многих странах мира. К таким наноструктурам, прежде всего, относятся молекулы фуллеренов, углеродные нанотрубки и нановолокна, свободный и эпитаксиальный графены, углеродные нанолуковицы и наноалмазы, кремниевые нанопиллары, пористый кремний, различные интеркалированные и гибридные структуры. При конструировании наноматериалов возникают важные задачи о расчете межатомных взаимодействий между отдельными наноструктурами, а также их взаимодействий с объемами и поверхностями полупроводников и металлов. Графит

выступает основным материалом для получения различных углеродных наноструктур. Например, путем пропускания электрического тока через графитовые электроды, которые находятся в расплаве ионной соли, образуется большой спектор наноматериалов. Графитовый электрод выступает также в качестве основы в методе распыления под действием электрического поля. Поэтому важно рассмотреть взаимодействие молекулы фуллерена C₆₀ и углеродной наночастицы с толстой графитовой пластиной как продуктов синтеза и исходного массивного материала. Этому вопросу посвящена настоящая статья. В работе применяется т.н. континуальное приближение, в рамках которого результирующий потенциал вычисляется путем интегрирования парного межатомного потенциала по поверхностям и объемам взаимодействующих тел [1, 2]. Применение данного приближения в нашем случае обосновывается возможным вращением адсорбирующейся молекулы фуллерена и углеродной наночастицы, которое естественным образом усредняет потенциал взаимодействия.

Взаимодействие атома углерода с толстой графитовой пластиной

Будем предполагать, что межатомное взаимодействие не приводит деформациям молекулы фуллерена, наночастицы и графита. В качестве парного потенциала во всех расчетах используется потенциал Леннарда-Джонса

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

где r – расстояние между атомами, D и r_0 – глубина потенциальной ямы и равновесное расстояние. Для гомоатомной пары – имеем значения [3]: $r_0 = 0,3985$ нм; $D = 3,202$ мэВ.

Будем рассматривать идеальный графит. Чтобы найти потенциал взаимодействия атома углерода с толстой графитовой пластиной, необходимо проинтегрировать (1) по бесконечному полупространству

$$U_a(z) = n_G \iiint_{\Omega} \phi(r) dV. \quad (2)$$

Здесь r – это расстояние между атомом углерода и произвольной точкой в объеме пластины, z – ближайшее расстояние от атома до поверхности пластины ($z \leq r$), $n_G = 112$ нм⁻³ – объемная плотность атомов графита [4]. Интеграл (2) можно вычислить, если в полупространстве ввести в рассмотрение шаровой сегмент радиусом r и объемом $V = \pi(2r+z)(r-z)^2/3$. С учетом этого (2) принимает вид

$$U_a(z) = 2\pi n_G \int_z^{\infty} (r^2 - rz) \phi(r) dr. \quad (3)$$

Подставляя (1) в (3) и выполняя интегрирование, находим

$$U_a(z) = \frac{U_0}{2} \left[\left(\frac{z_0}{z} \right)^9 - 3 \left(\frac{z_0}{z} \right)^3 \right], \quad (4)$$

$$U_0 = \frac{10}{9} \pi n_G D z_0^3, \quad z_0 = \frac{r_0}{\sqrt[9]{5}}$$

где U_0 и z_0 – энергия связи и равновесное расстояние в системе "атом-толстая пластина". Для равновесного расстояния и энергии связи получаются значения: $z_0 = 0,265$ нм; $U_0 = 23,28$ мэВ.

Взаимодействие молекулы фуллерена с толстой графитовой пластиной

Потенциал взаимодействия стороннего атома с молекулой фуллерена получается путем усреднения парного потенциала по поверхности сферы

$$U_a(z) = \frac{15}{\pi R^2} \iint_S \phi(r) dS, \quad (5)$$

где $R = 0,357$ нм – поверхностная плотность атомов углерода и радиус молекулы фуллерена. В равенстве (5) множитель перед интегралом означает поверхностную плотность атомов углерода в молекуле фуллерена C_{60} . Поверхностные плотности атомов углерода в графите и молекуле фуллерена можно приближенно считать одинаковыми, однако в данной работе, чтобы излишне не нарушать общность, мы будем их различать. В сферической системе координат имеем

$$r = \sqrt{\rho^2 + R^2 - 2\rho R \cos \Theta}, \quad dS = R^2 \sin \Theta d\Theta d\varphi, \quad (6)$$

$$0 \leq \varphi \leq 2\pi, \quad -\pi/2 \leq \Theta \leq \pi/2,$$

где ρ – расстояние между атомом и центром молекулы фуллерена, Θ и φ – углы в сферической системе координат. С учетом (6) интеграл (5) преобразуется к виду

$$U_a(\rho) = 30 \int_{-1}^1 \phi \left(\sqrt{\rho^2 + R^2 + 2\rho R x} \right) dx. \quad (7)$$

Далее требуется получить потенциал взаимодействия «фуллерен-графит». Для этого требуется (7) усреднить по бесконечному полупространству:

$$U(z) = 2\pi n_G \int_z^\infty (\rho^2 - \rho z) U_a(\rho) d\rho =$$

$$= 60\pi n_G \int_z^\infty \left\{ \int_{-1}^1 \phi \left(\sqrt{\rho^2 + R^2 + 2\rho R x} \right) dx \right\} (\rho^2 - \rho z) d\rho. \quad (8)$$

В результате подстановки (1) в (8) и интегрирования получаем

$$U(z) = \frac{\pi n_G r_0^4 D}{12R} \left\{ \left(\frac{r_0}{z-R} \right)^8 - \left(\frac{r_0}{z+R} \right)^8 + 60 \left[\left(\frac{r_0}{z-R} \right)^2 - \left(\frac{r_0}{z+R} \right)^2 \right] \right\}. \quad (9)$$

По формуле (9) был проведен расчет потенциала взаимодействия молекулы фуллерена C_{60} с толстой графитовой пластиной. Результат расчета представлен на рисунке. Равновесное расстояние и энергия связи для полученной потенциальной кривой (сплошная кривая 1 на рисунке) равны 0.255 нм и ~ 0.669 эВ.

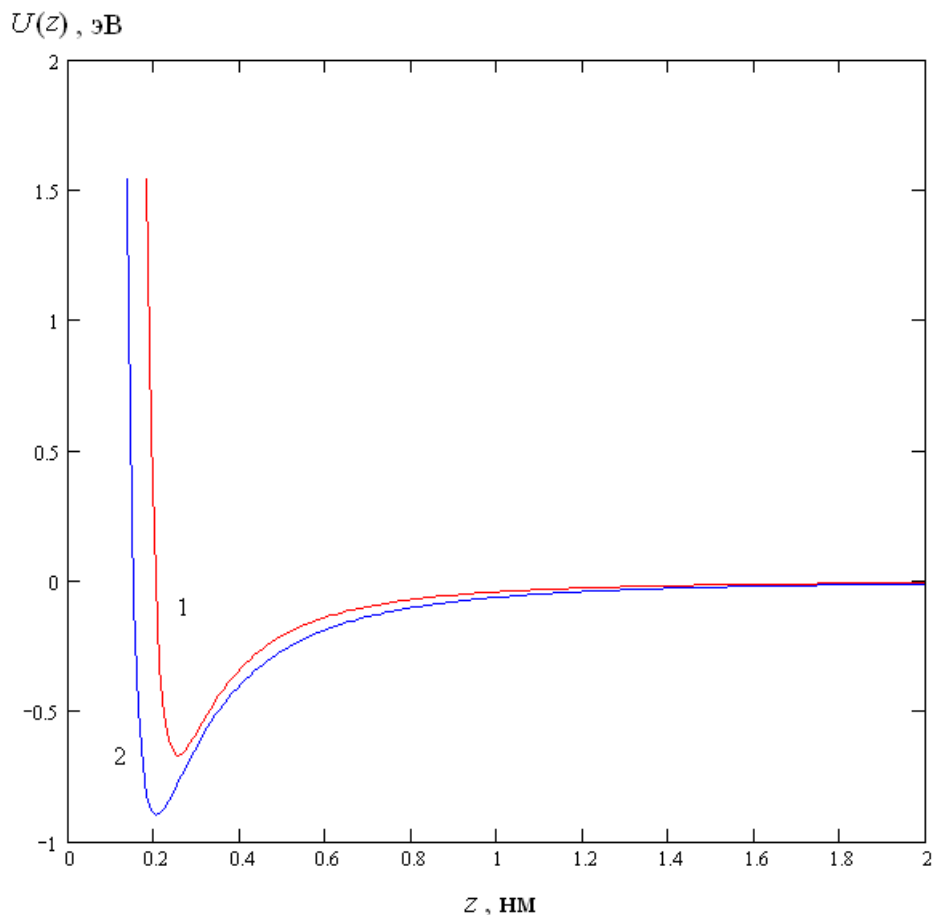


Рисунок. Графики потенциалов взаимодействия молекулы фуллерена (кривая 1) и наночастицы (кривая 2) с толстой графитовой пластиной. Расстояние z соответствует ближайшему расстоянию между взаимодействующими телами

Взаимодействие наночастицы с толстой графитовой пластиной

В континуальном приближении потенциал взаимодействия наночастицы с графитовой пластиной дается выражением

$$U = n_{GNP} \int_{\Omega_2} \int_{\Omega_1} \phi(r) dV_1 dV_2, \tag{10}$$

где n_p – объемная плотность атомов наночастицы. Интегрирование в (10) проводится по объемам взаимодействующих тел. Если считать, что наночастица имеет плотноупакованную структуру, то плотность атомов будет равна $n_p = 3/(4\pi r_A^3)$, где $r_A = 0,077$ нм – ковалентный радиус атома углерода [5]. Таким образом, для плотности атомов наночастицы получается значение $n_p = 523 \text{ нм}^{-3}$. Количество атомов в наночастице, радиус которой совпадает с радиусом молекулы фуллерена, равна $(R/r_A)^3 \approx 100$.

С использованием сферической системы координат (10) преобразуется к виду

$$U(z) = (2\pi)^2 n_{GNP} \int_{-1}^1 \int_0^R \int_{h(\xi,\eta,z)}^{\infty} [\rho - h(\xi,\eta,z)] \phi(\rho) \rho d\rho \xi^2 d\xi d\eta, \tag{11}$$

$$h(\xi, \eta, z) = \sqrt{z^2 + \xi^2 - 2z\xi\eta},$$

где z – расстояние от центра наночастицы до поверхности пластины, R – радиус наночастицы. Подставляя (1) в (11) и выполняя интегрирование, находим

$$U(z) = \frac{4}{3}\pi^2 n_{GNP} D r_0^6 \left[\frac{r_0^6}{1575} \frac{3R^7 + 42R^5 z^2 + 35R^3 z^4}{z(z^2 - R^2)^6} + \frac{R}{z} - \ln \left(\sqrt{\frac{z+R}{z-R}} \right) \right]. \quad (12)$$

По формуле (12) был проведен расчет потенциала взаимодействия наночастицы с толстой графитовой пластиной. Предполагается, что радиус наночастицы равен радиусу молекулы фуллерена. Результат расчета представлен на рисунке. Равновесное расстояние и энергия связи для полученной потенциальной кривой (сплошная кривая 2 на рисунке) равны 0.205 нм и ~ 0.898 эВ.

Заключение

В настоящей работе проведен расчет потенциалов взаимодействия молекулы фуллерена и наночастицы при плотной упаковке на толстой графитовой пластине. Расчеты показывают, что энергия связи наночастицы с толстой графитовой пластиной превышает аналогичную энергию для молекулы фуллерена на 0.23 эВ. В условиях равновесия наночастица находится ближе к поверхности графита, чем молекула фуллерена на 0.05 нм.

Список литературы/References

- [1] Товбин Ю.К., *Молекулярная теория адсорбции в пористых телах*, Физматлит, М., 2012, 624 с. [Tovbin Yu.K., *Molekulyarnaya teoriya adsorbtsii v poristykh telakh*, Fizmatlit, M., 2012, 624 pp.]
- [2] Рехвиашвили С. Ш., *Размерные явления в физике конденсированного состояния*, Изд-во КБНЦ РАН, Нальчик, 2014, 250 с. [Rekhviashvili S. Sh., *Razmernyye yavleniya v fizike kondensirovannogo sostoyaniya*, Izd-vo KBNTS RAN, Nal'chik, 2014, 250 pp.]
- [3] Palucha S., Gburski Z., Biesiada J., "A molecular dynamics study of fullerene-carbon monoxide mixture", *Journal of Molecular Structure*, **704**:1 (2004), 269-273.
- [4] Кнунянц И.Л., *Краткая химическая энциклопедия*. Т.5, Советская энциклопедия, М., 1967. [Knunyants I.L., *Kratkaya khimicheskaya entsiklopediya*. V.5, Sovetskaya entsiklopediya, M., 1967].
- [5] Ола Дж., Пракаш Г.К.С., Уильямс Р.Е., Филд Л.Д., Уейд К., *Химия гиперкоординированного углерода*, Мир, М., 1990, 336 с. [Ola Dzh., Prakash G.K.S., Uil'yams R. Ye., Fild L. D., Uyeyd K., *Khimiya giperkoodinirovannogo ugleroda*, Mir, M., 1990, 336 pp.]

Список литературы (ГОСТ)

- [1] Товбин Ю.К. Молекулярная теория адсорбции в пористых телах. М.: Физматлит, 2012. – 624 с.
- [2] Рехвиашвили С.Ш. Размерные явления в физике конденсированного состояния. Нальчик: Изд-во КБНЦ РАН, 2014. – 250 с.
- [3] Palucha S., Gburski Z., Biesiada J. A molecular dynamics study of fullerene-carbon monoxide mixture // Journal of Molecular Structure. 2004. vol. 704. no. 1. p. 269-273.

- [4] Кнунянц И.Л. Краткая химическая энциклопедия. Том 5. М.: Советская энциклопедия, 1967.
- [5] Ола Дж., Пракаш Г.К.С., Уильямс Р.Е., Филд Л.Д., Уейд К. Химия гиперкоординированного углерода. М.: Мир, 1990. 336 с.

Для цитирования: Бухурова М. М. Потенциалы взаимодействия молекулы фуллерена C₆₀ и углеродной наночастицы с толстой графитовой пластиной // *Вестник КРАУНЦ. Физ.-мат. науки*. 2019. Т. 28. № 3. С. 58-64. DOI: 10.26117/2079-6641-2019-28-3-58-64

For citation: Bukhurova M. M. The interaction potentials of the fullerene C₆₀ molecule and carbon nanoparticles with a thick graphite plate, *Vestnik KRAUNC. Fiz.-mat. nauki*. 2019, **28**: 3, 58-64. DOI: 10.26117/2079-6641-2019-28-3-58-64

Поступила в редакцию / Original article submitted: 04.10.2019

DOI: 10.26117/2079-6641-2019-28-3-58-64

PHYSICS

MSC 82D80

THE INTERACTION POTENTIALS OF THE FULLERENE C₆₀ MOLECULE AND CARBON NANOPARTICLES WITH A THICK GRAPHITE PLATE

M. M. Bukhurova

Institute of Applied Mathematics and Automation, 360000, Nalchik,
Shortanova st., 89 A, Russia

E-mail: marena.bukhurova@mail.ru

Using the Lennard-Jones pair-potential analytical expressions are derived for the potentials and interaction forces of the C₆₀ fullerene molecule and a carbon nanoparticle with a thick graphite plate. Numerical calculations of the interaction potentials and the equilibrium parameters of the interaction of the fullerene molecule and the carbon nanoparticle with the sample are carried out.

Key words: Lennard Jones potential, fullerene molecule, graphite plate, carbon nanoparticles, equilibrium distance

© Bukhurova M. M., 2019