

КОМПЬЮТЕРНЫЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ МИГРАЦИИ АТОМА НИКЕЛЯ НА ПОВЕРХНОСТИ ФУЛЛЕРЕНА C₆₀

Жабборов Х.И.^{1,2}, Ядгаров И.Д.³

¹Ташкентский государственный технический университет имени И.А.Каримова, Ташкент,
Узбекистан

²Ташкентский международный университет образования, Ташкент, Узбекистан

³Институт ионно-плазменных и лазерных технологий имени У.А.Арифова, Ташкент,
Узбекистан

E-mail: xayitmurodjon@mail.ru

DOI: 10.61587/mmit.tiue.uz.v1i1.379

Аннотация. В данной работе рассматривается применение методов компьютерного моделирования для исследования миграции атома никеля на поверхности фуллерена C₆₀. Основное внимание уделяется молекулярно-динамическому моделированию температурно-зависимого движения атома никеля, анализу его взаимодействия с углеродным каркасом и обработке полученных расчётных данных. Использование специализированных программных средств позволяет оценить особенности поведения наносистемы при различных температурах и выявить условия, при которых наблюдается миграция атома по поверхности фуллерена. Полученные результаты могут быть использованы в области наноматериалов, вычислительной физики и прикладных информационных технологий.

Ключевые слова: компьютерное моделирование, молекулярная динамика, атом никеля, фуллерен C₆₀, миграция атома, наносистема, температурная зависимость, численное моделирование.

COMPUTER MODELING OF NICKEL ATOM MIGRATION ON THE SURFACE OF FULLERENE C₆₀

Kh.I. Jabborov^{1,2}, I.D. Yadgarov³

¹Tashkent State Technical University named after I.A. Karimov, Tashkent, Uzbekistan

²Tashkent International University of Education, Tashkent, Uzbekistan

³U.A. Arifov Institute of Ion-Plasma and Laser Technologies, Tashkent, Uzbekistan

E-mail: xayitmurodjon@mail.ru

Abstract. This work considers the application of computer modeling methods to study the migration of a nickel atom on the surface of fullerene C₆₀. The main focus is on molecular dynamics simulation of the temperature-dependent motion of the nickel atom, analysis of its interaction with the carbon framework, and processing of the obtained computational data. The use of specialized software tools makes it possible to evaluate the behavior of the nanosystem at different temperatures and to identify the conditions under which atomic migration occurs on the fullerene surface. The obtained results can be applied in nanomaterials research, computational physics, and applied information technologies.

Keywords: computer modeling, molecular dynamics, nickel atom, fullerene C₆₀, atomic migration, nanosystem, temperature dependence, numerical simulation.

Введение

Современные информационные технологии широко применяются в научных исследованиях, особенно при компьютерном моделировании сложных наносистем. Миграция атома никеля на поверхности фуллерена C₆₀ представляет интерес для изучения свойств наноматериалов и их возможного применения в электронике, катализе и материаловедении. Использование методов молекулярной динамики позволяет исследовать движение атома при различных температурах и анализировать его взаимодействие с углеродным каркасом. Взаимодействие атомов переходных металлов

с молекулами фуллеренов привлекает значительное внимание благодаря потенциальным областям применения в катализе, молекулярной электронике и разработке наноматериалов [1-3]. Особый интерес представляют фуллерены, функционализированные никелем, поскольку присутствие экзотома никеля может изменять электронные и магнитные свойства углеродного каркаса, влияя на его химическую активность и стабильность [4,5]. Предыдущие исследования методом DFT показали, что экзодрические атомы переходных металлов преимущественно адсорбируются в местах C–C-мостиков на поверхности C₆₀ с энергиями взаимодействия порядка 1 эВ [6]. Понимание механизмов миграции атомов металла на поверхности фуллерена имеет решающее значение для контроля этих свойств в наномасштабе [7,8].

Методы исследование

Все симуляции в этой работе были выполнены с использованием пакета LAMMPS с открытым исходным кодом, основанного на методах молекулярной динамики (МД) [9]. Координаты молекул фуллерена C₆₀ были подготовлены с помощью программы Nanotube Modeler. Атомные координаты фуллерена C₆₀ были сгенерированы в LAMMPS и впоследствии релаксированы с использованием классической минимизации энергии с помощью алгоритма сопряженных градиентов. Релаксация проводилась в рамках той же межатомной потенциальной структуры, которая использовалась для последующих симуляций молекулярной динамики. Квантово-химическая (DFT или Gaussian) структурная оптимизация не применялась, поскольку целью данного исследования является изучение динамики миграции, обусловленной температурой, в течение длительного времени моделирования. Длины связей Ni–C были проанализированы и визуализированы с помощью программы JMOl для изучения конфигурации адсорбции Ni@C₆₀. Для поддержания выбранной температуры в ансамбле NVT использовался термостат Нозе–Хувера [10,11].

Первая часть предназначена для описания взаимодействия в плоскости фуллерена C₆₀. Для взаимодействия C–C можно использовать известные потенциалы, например, адаптированный эмпирический потенциал межмолекулярного взаимодействия AIREBO [12]. Он хорошо проверен и активно используется для изучения углеродных структур [13]. Потенциал состоит из трех частей:

$$E = \frac{1}{2} \sum_i \sum_{j \neq i} E_{ij}^{REBO} + E_{ij}^{LJ} + \sum_{k \neq i,j} \sum_{l \neq i,j,k} E_{kijl}^{TORSION}, \quad (1)$$

где — энергия ковалентного взаимодействия, — энергия Ван дер Ваальса, — энергия вращения плоскости. Межатомные взаимодействия были описаны с использованием гибридной потенциальной схемы, реализованной в LAMMPS.

Взаимодействие Ni–C было описано потенциалом Морзе с расстоянием отсечки 4,0 Å, что позволяет непрерывно ослаблять связь и естественным образом диссоциировать во время миграционных событий. Аналитическая форма потенциала Морзе задается следующим образом:

$$U(r) = D_e \left[\left(1 - e^{-\alpha(r-R_e)} \right)^2 - 1 \right], \quad (2)$$

где r — расстояние между атомами, D_e — энергия разрыва связи, R_e — равновесная длина связи, α — жесткость связи.

Результаты и обсуждение

Для анализа динамики движения экзотома никеля относительно поверхности фуллерена были рассчитаны и сохранены временные ряды энергии связи

Ni–C₆₀, записанные с интервалом 0,1 пс. Такой подход позволяет идентифицировать моменты перехода никеля между различными положениями адсорбции, поскольку миграционные события сопровождаются характерными скачками или изменениями энергии взаимодействия. Полученные временные зависимости показывают, что при повышенных температурах наблюдаются значительные флуктуации энергии связи, отражающие динамическую реструктуризацию локального окружения и миграцию экзотома в новые стабильные или метастабильные положения на поверхности C₆₀. На рисунке 2 показана серия снимков конфигураций системы, демонстрирующих характер миграции экзотома Ni в разные моменты времени и подтверждающих переходы между различными областями поверхности фуллерена.

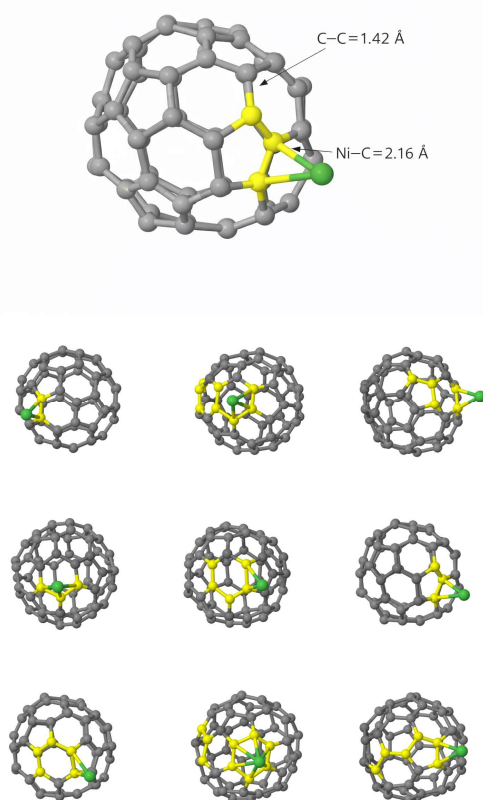


Рис. 2. Равновесные длины связей C–C в фуллере C₆₀ — 1,42 Å и Ni–C — 2,16 Å, а также траектория миграции экзотома Ni на поверхности C₆₀ по данным молекулярно-динамического моделирования в течение 1000 пс. Показаны характерные адсорбционные положения и переходы между ними, отражающие температурно-индуцированную подвижность атома никеля.

Временной анализ показывает, что характерные переходные времена между локальными минимумами составляют приблизительно 5–15 пс. Этот диапазон согласуется с типичными временными масштабами тепловых колебаний углеродного каркаса при исследуемой температуре. Это предполагает, что миграция экзотома в основном обусловлена температурно-индуцированными деформациями структуры фуллерена, которые периодически изменяют высоту барьера на потенциальной поверхности и создают условия для скачкообразного перемещения. Другими словами, миграция термически активирована, что типично для адатомов на наноструктурированных углеродных поверхностях. Таким образом, полученные результаты демонстрируют связь между динамикой экзотома и колебательными

деформациями фуллерена, что позволяет интерпретировать временной ряд как отклик системы на изменение локального рельефа потенциальной энергии.

Заключение

В работе показано, что метод компьютерного моделирования позволяют эффективно исследовать миграцию атома никеля на поверхности фуллерена C₆₀. Молекулярно-динамическое моделирование позволило определить особенности движения атома Ni, характерные положения адсорбции и влияние температуры на его подвижность. Полученные результаты могут быть полезны для дальнейшего изучения наносистем и разработки новых функциональных материалов.

Список литературы

1. Neyts, E. C., Bogaerts. Formation of endohedral Ni@ C60 and exohedral Ni-C60 metallofullerene complexes by simulated ion implantation. Carbon 47, 3177–3184 (2009). DOI:10.1016/j.carbon.2008.12.023
2. Lebedeva, I. V., Knizhnik, A. A., Popov, A. M., & Potapkin, B. V. Ni-assisted transformation of graphene flakes to fullerenes: molecular dynamics study. J. Phys. Chem. C 116, 7374–7385 (2012). DOI: 10.1021/jp212080n
3. U.K. Makhmanov, A.M. Kokhkharov, S.A. Bakhramov, S.A. Esanov. Synthesis of fullerene C60 nanotubes in the volume of an evaporating drop of colloidal solution // Romanian Journal of Physics, 2022, Vol. 67, No. 1-2, pp. 601 (1-9).
4. Verkhovtsev, A. V., Schramm, S., & Solov'yov, A. V. Molecular dynamics study of the stability of a carbon nanotube atop a catalytic nickel nanoparticle. J. Phys. Chem. C 118, 16521–16529 (2014). DOI: 10.1021/jp503729v
5. Haghgoo, S. & Nekoei, A.-R. Metal oxide (including NiO) adsorption on fullerene C₆₀: a DFT study. RSC Advances 11, 17377–17390 (2021). DOI: 10.1039/D1RA02251B
6. Sehrish Sarfaraz et al., Metallofullerenes as Robust Single-Atom Catalysts for Adsorption and Dissociation of Hydrogen Molecules: A Density Functional Study, ACS Omega 8 (39) (2023) 36493–36505. doi:10.1021/acsomega.3c05477
7. Apriati, Y. N., Nugraheni, A. D., & Sholihun, S. Interaction of small molecules with fullerene C₆₀: DFT study of adsorption energy. Materials Science Forum 1066, 135–143 (2022). DOI: 10.4028/p-ea93gt
8. Aziz, M. T., Gill, W. A., Khosa, M. K., Jamil, S., & Janjua, M. R. S. A. Adsorption of molecular H₂ on a fullerene (C₆₀) surface: combined DFT and MD study. RSC Advances 14, 36546–36556 (2024). DOI: 10.1039/D4RA06171C
10. Sandia National Laboratories, Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator (LAMMPS), 2023, <https://www.lammps.org/>
11. W.G. Hoover, “Canonical dynamics: Equilibrium phase-space distributions”, Physical Review A, 31, 1695 (1985). <https://doi.org/10.1103/PhysRevA.31.1695>
12. I.Urolov, F.Umarov, I.Yadgarov, G.Rakhmanov, Kh.Jabborov. Computer Simulation of Adsorption of C60 Fullerene Molecule on Reconstructed Si(100) Surface // No. 2 (2024): East European Journal of Physics. P.256-262. DOI: <https://doi.org/10.26565/2312-4334-2024-2-25>
13. Xueming Yang, Sihan Wu, Jiangxin Xu, Bingyang Cao, Albert C. To // Spurious heat conduction behavior of finite-size graphene nanoribbon under extreme uniaxial strain caused by the AIREBO potential. Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures. Volume 96, February 2018, Pages 46-53. <https://doi.org/10.1016/j.physe.2017.10.006>
14. Poletaev G.M., Zorya I.V., Rakitin R.Yu., Iliina M.A. Interatomic potentials for describing impurity atoms of light elements in fcc metals // Mater. Phys. Mech. 2019. V. 42(4). P. 380–388. http://dx.doi.org/10.18720/MPM.4242019_2