

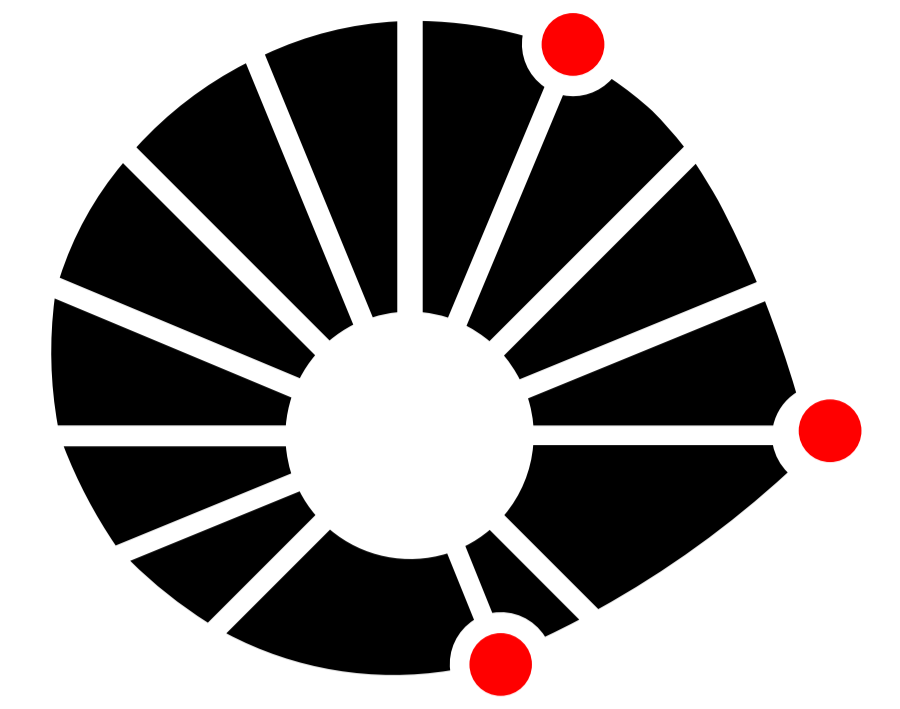
Filmes de Argônio em substratos de Grafeno

Uma análise através da dinâmica molecular

Lucas Madeira* e Silvio A. Vitiello†

Instituto de Física “Gleb Wataghin” – Universidade Estadual de Campinas
13083 - 970, Campinas - SP, Brasil

*madeira@ifi.unicamp.br †vitiello@ifi.unicamp.br



UNICAMP

Resumo

Estudamos as interações atômicas entre átomos de Argônio e uma folha de grafeno e fenômenos de adsorção, nas fases sólida e líquida através do método de simulações de dinâmica molecular. O potencial Lennard-Jones foi utilizado para descrever as interações Argônio-Argônio e Argônio-Grafeno, sendo que os átomos de Carbono permaneceram em uma rede hexagonal ideal. Calculamos quantidades físicas de interesse nos *ensembles* NVE e NVT, para diversas densidades e temperaturas. Analisamos os resultados obtidos para o perfil de adsorção, a distância da primeira camada adsorvida ao substrato, a função radial de distribuição de pares e o calor isostérico. Nossos resultados são compatíveis aos da literatura para nanotubos de Carbono, e também Argônio em substratos de grafite.

Introdução

• **Grafeno:** nome dado a uma única camada atômica de grafite. A importância deste material foi reconhecida em 2010 quando o prêmio Nobel de Física foi atribuído aos pioneiros que investigaram este sistema. A **motivação** deste trabalho é entender melhor algumas das propriedades deste material.

• **Adsorção (física):** adesão de átomos a uma superfície

• **Dinâmica molecular:** as trajetórias das partículas são obtidas através das soluções das equações de Newton. São considerados pequenos intervalos de tempo de tal forma que os resultados sejam acurados

• Área superficial específica do Argônio em grafeno: $S_s = (16,1 \pm 0,1) \text{ \AA}^2$. Resultado para Argônio em nanotubos de Carbono ($13,2 \text{ \AA}^2$ [2])

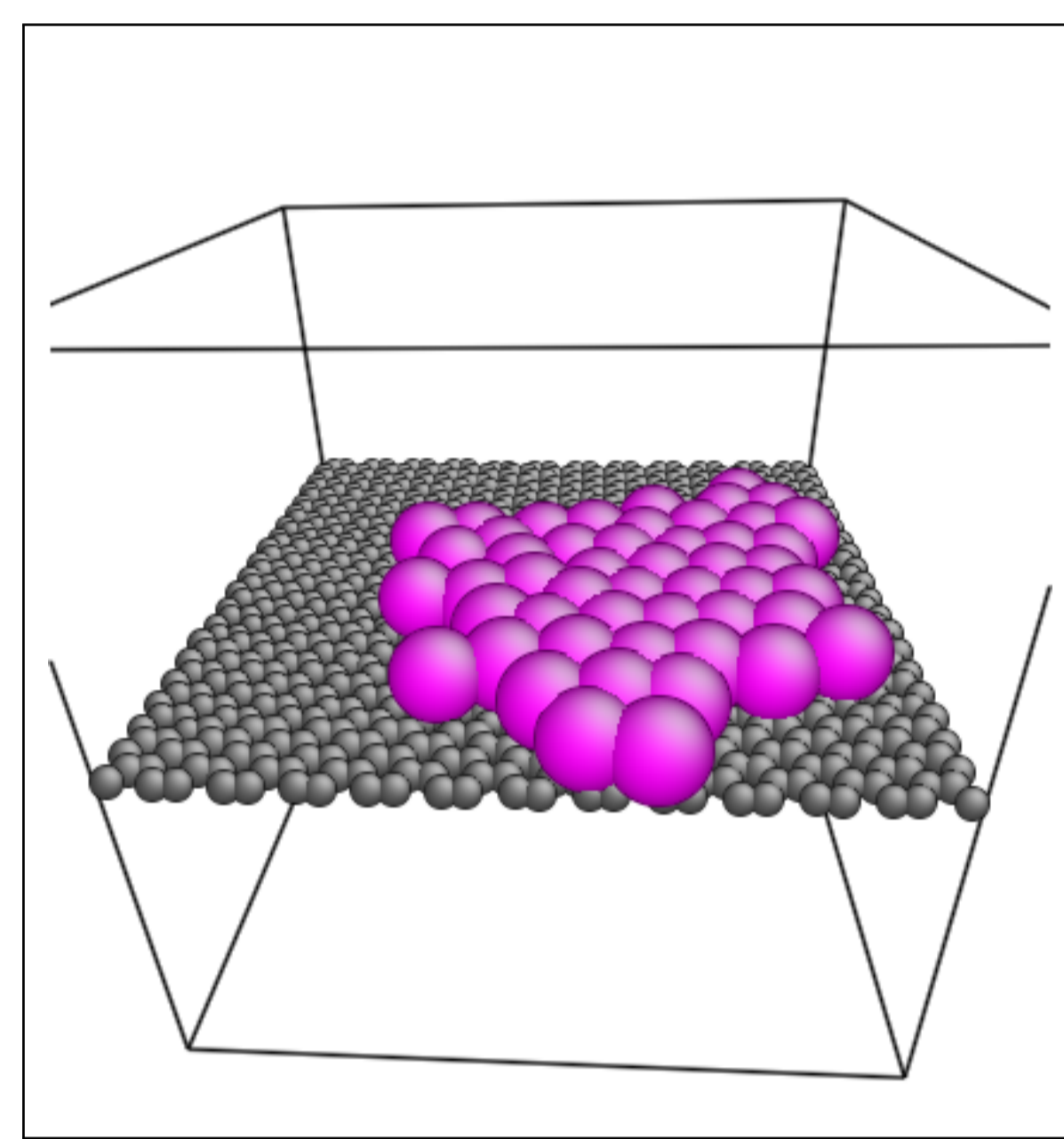


Figura 2: Cobertura para $(\rho; T) = (0,312; 40K)$.

de Argônio. A distância média ($\langle z \rangle$) foi calculada para várias densidades e temperaturas

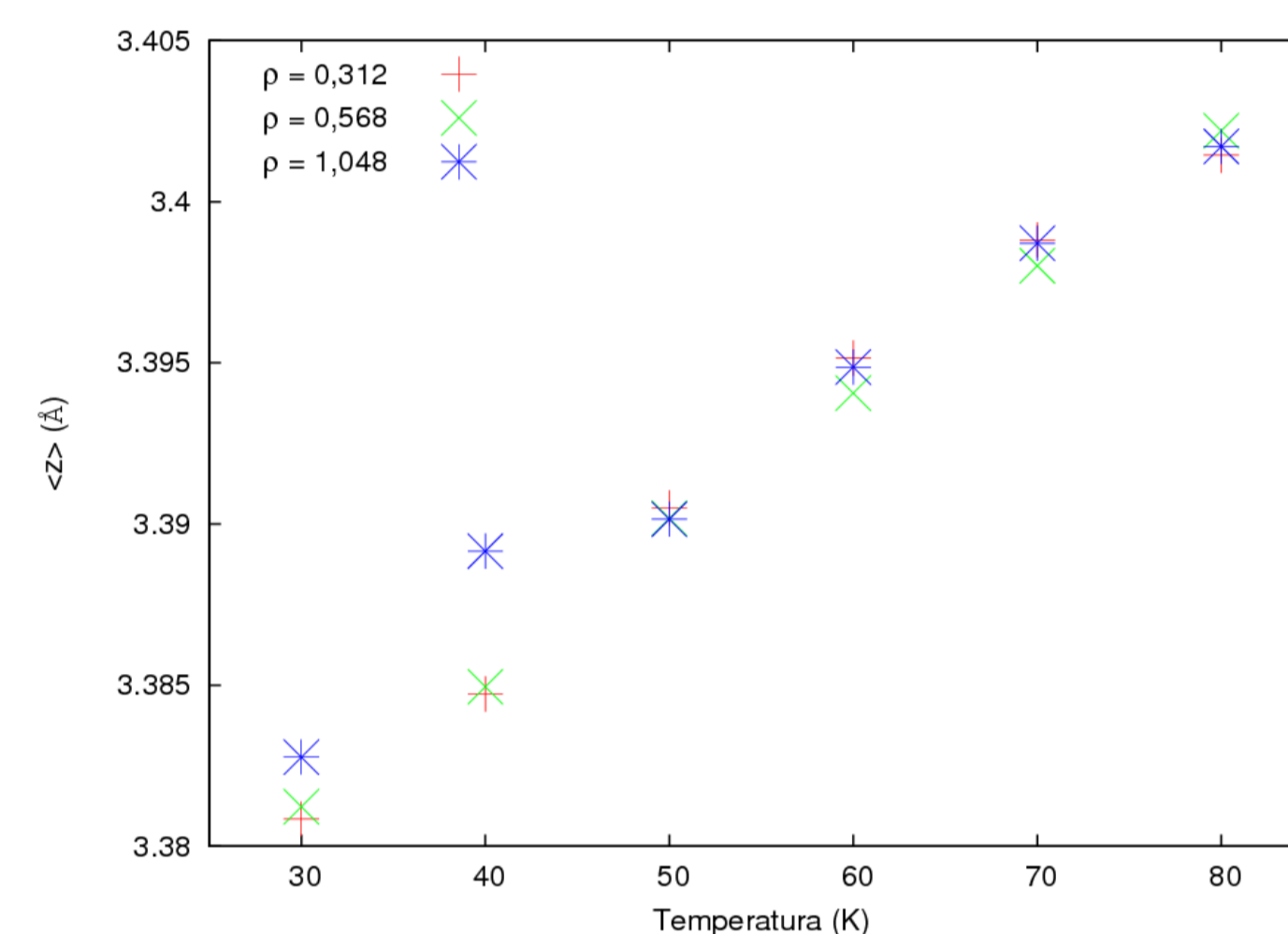


Figura 6: Distância da primeira camada adsorvida ao substrato para diversas coberturas e temperaturas.

• Transição para $\rho = 1,048$ e T entre 30 e 40K. Para Ar em grafite [3], temos a mesma transição entre 60 e 70K

se movimentar em um plano paralelo à folha. Essa perda de energia cinética se dá na forma de calor, o chamado calor isostérico (q_{st}).

$$q_{st} = \frac{1}{N_{Ar}} \sum_{i \in Ar} U_i, \quad (2)$$

onde U_i é a energia potencial do i -ésimo átomo de Argônio.

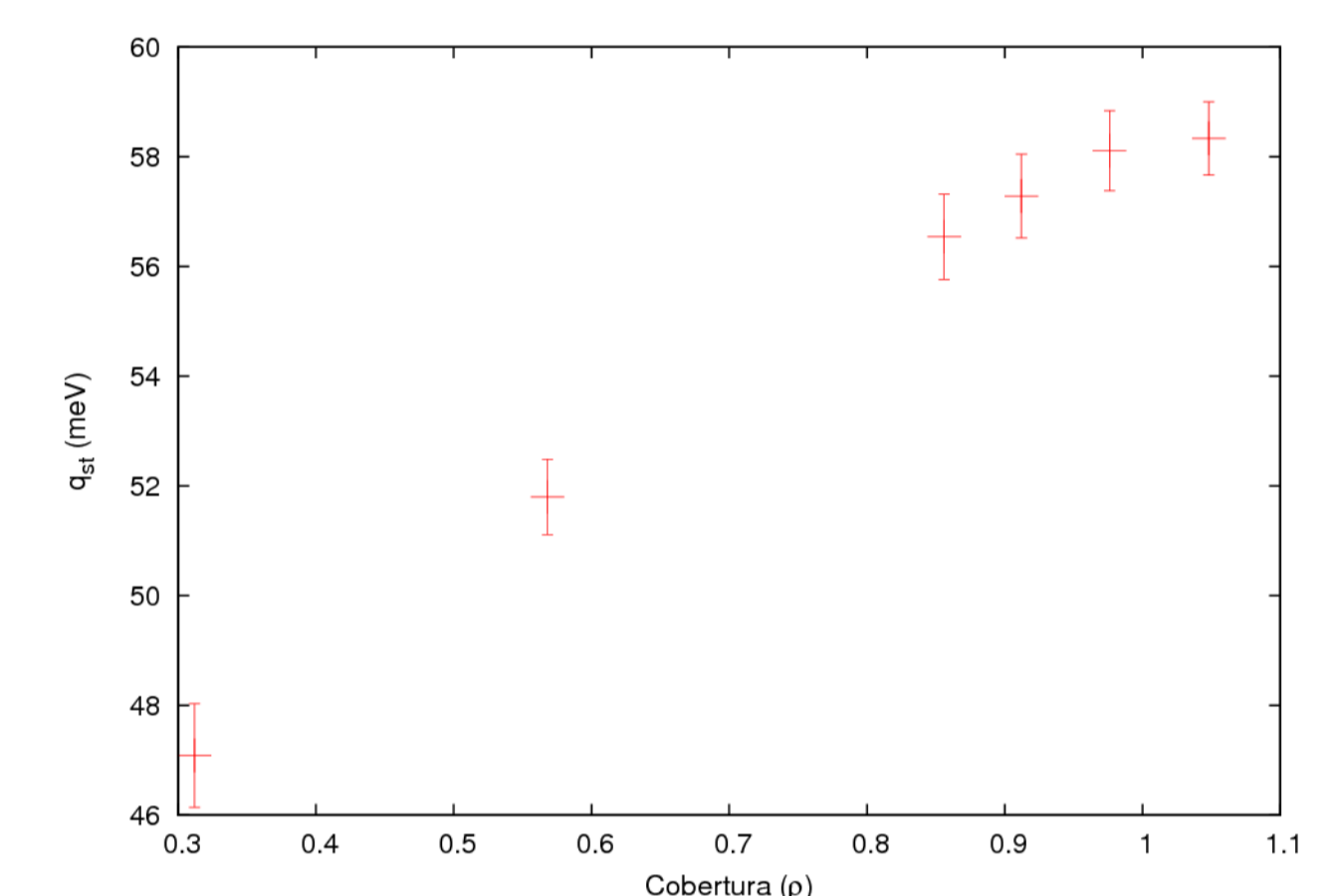


Figura 9: Valores de calor isostérico para $\rho = 0,312; 0,568; 0,856; 0,912; 0,976; 1,048$. O sinal negativo dos calores, o qual indica perda, foi omitido no gráfico.

• Calores isostéricos encontrados para nanotubos de Carbono [2] variam de -85 a -70 meV, dependendo do diâmetro do tubo utilizado.

Potencial de Interação

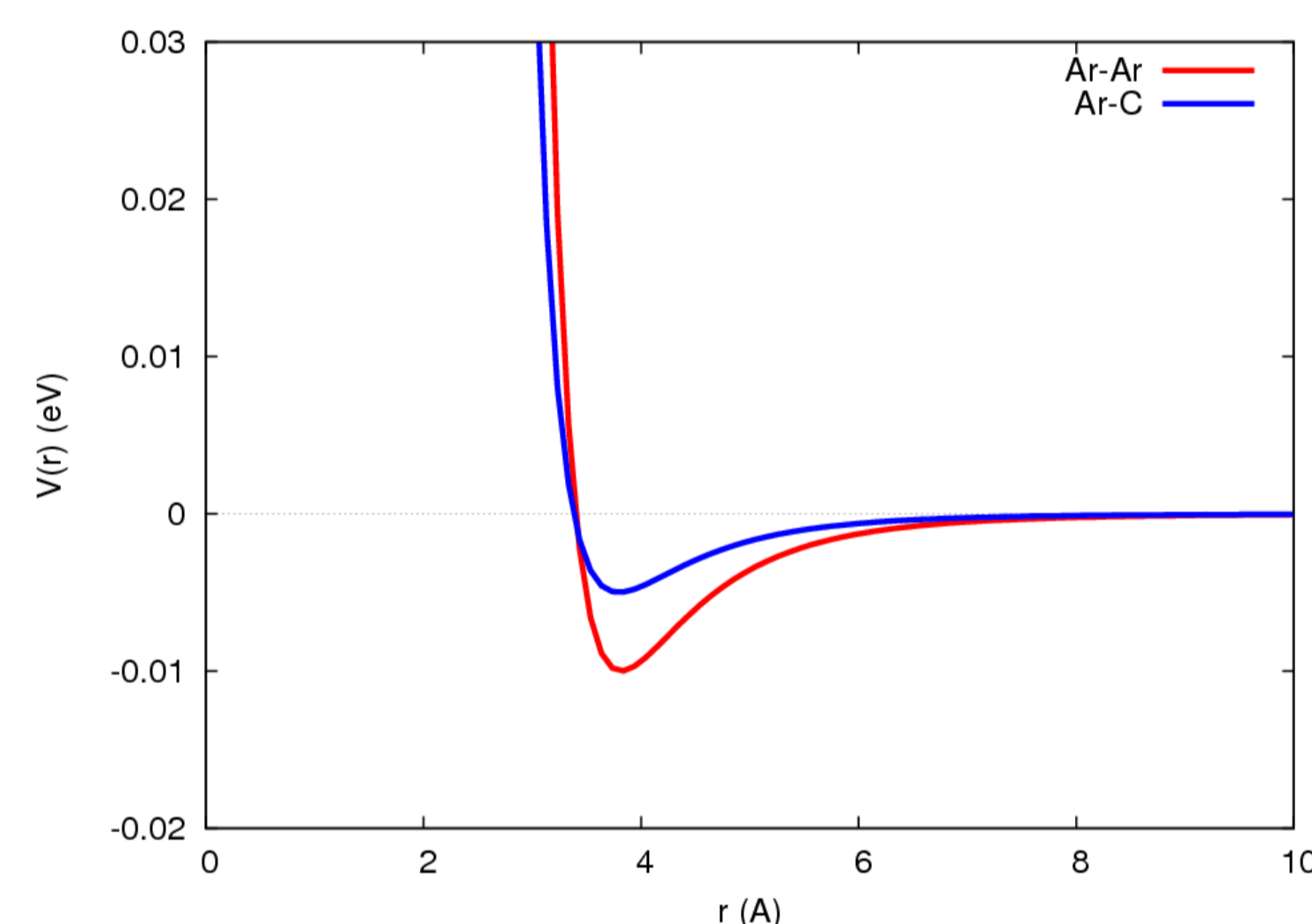


Figura 1: Potencial de Lennard-Jones

$$V(r) = 4\epsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right] \quad (1)$$

• $\sigma_{Ar-Ar} = 3,40 \text{ \AA}$, $\epsilon_{Ar-Ar} = 0,010 \text{ eV}$

• $\sigma_{Ar-C} = 3,38 \text{ \AA}$, $\epsilon_{Ar-C} = 0,005 \text{ eV}$

Simulação do Sistema Ar-C

• Folha de grafeno: 960 C, com posições fixas, arranjados em uma rede hexagonal, de dimensões $L_x = 51,1 \text{ \AA}$ e $L_y = 49,2 \text{ \AA}$

• N_{Ar} átomos de Argônio, os quais variam de 50 a 165 nas simulações

• *Ensembles* NVE e NVT

• Número de iterações: 10.000.000 (1.000.000 para atingir o equilíbrio); *time step* (Δt) de 1 fs

• Caixa de simulação: $L_x = 51,1 \text{ \AA}$, $L_y = 49,2 \text{ \AA}$ e $L_z = 51,00 \text{ \AA}$; raio de corte de 11,0 \AA ; condições periódicas de contorno em duas dimensões, átomos de Argônio podem evaporar na direção normal à folha de grafeno

• LAMMPS (*Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator*) [1]

Resultados - Ensemble NVT

Cobertura e sítios de adsorção

• Parâmetro ρ indica a cobertura. Monocamada $\rightarrow \rho = 1$

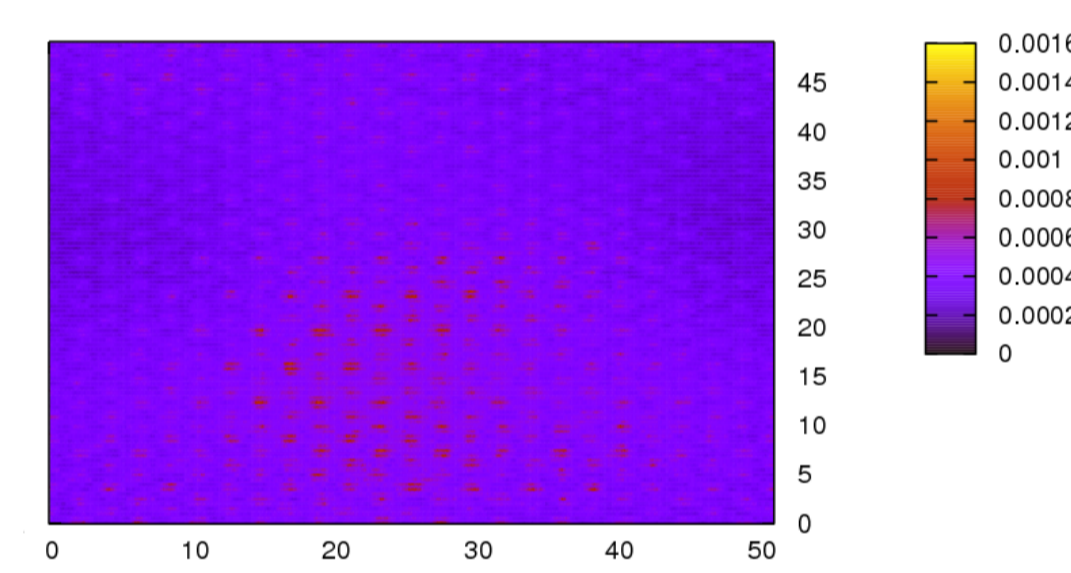


Figura 3: Adsorção dos átomos de Ar no substrato de grafeno para $(\rho; T) = (0,312; 40K)$.

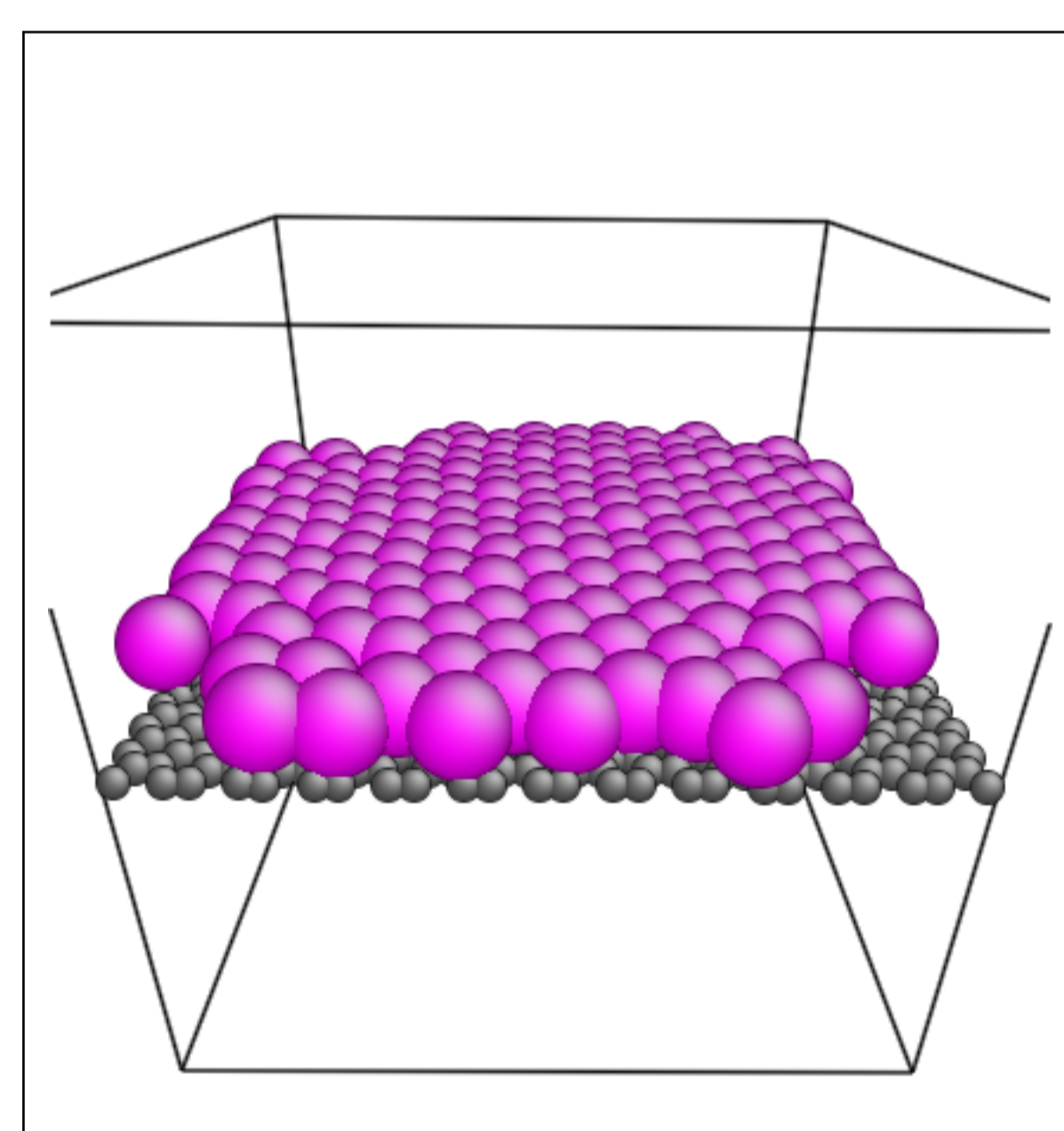


Figura 4: Cobertura para $(\rho; T) = (0,976; 40K)$.

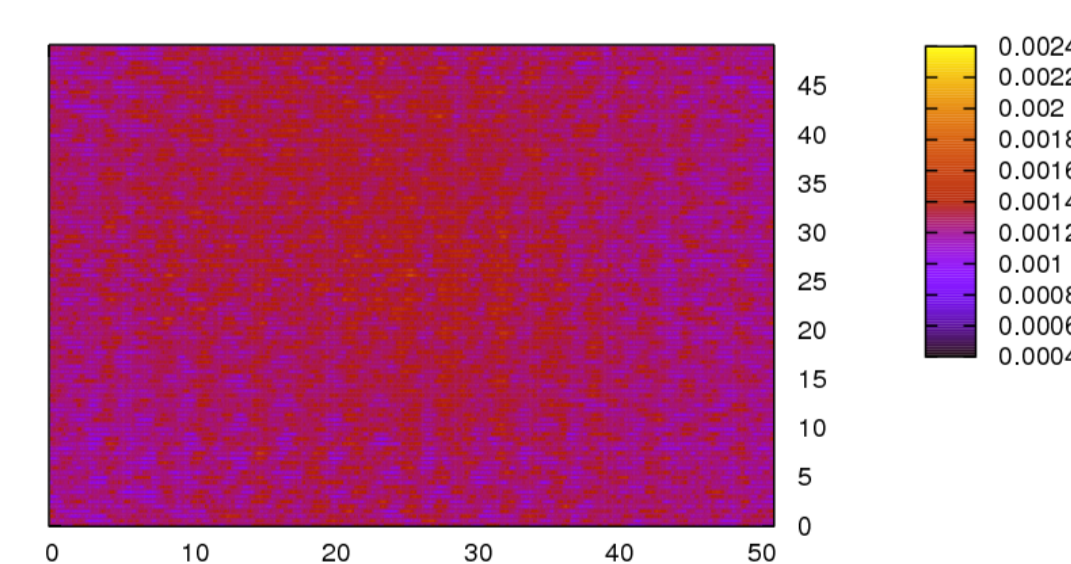


Figura 5: Adsorção dos átomos de Ar no substrato de grafeno para $(\rho; T) = (0,976; 40K)$.

Função Radial de Distribuição de Pares

• Medida de correlação entre as partículas de um sistema de muitos corpos

• Densidade local: número médio de partículas entre r e $r + dr$ é $\rho g(r) dr$

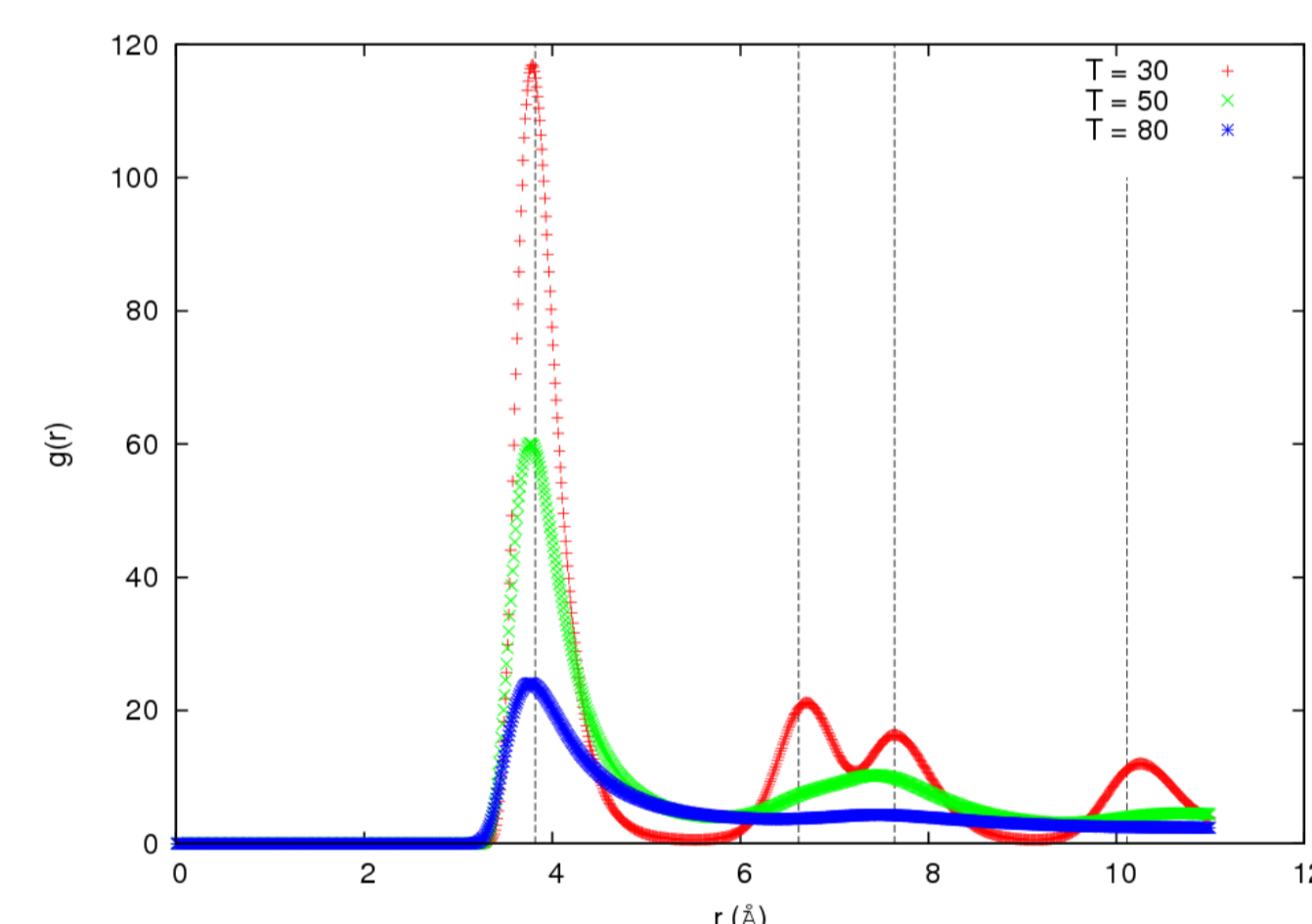


Figura 7: A função $g(r)$ para $\rho = 0,312$ e $T = 30, 50$ e 80 . Em pontilhado, estão os picos esperados em um sistema de Ar bidimensional.

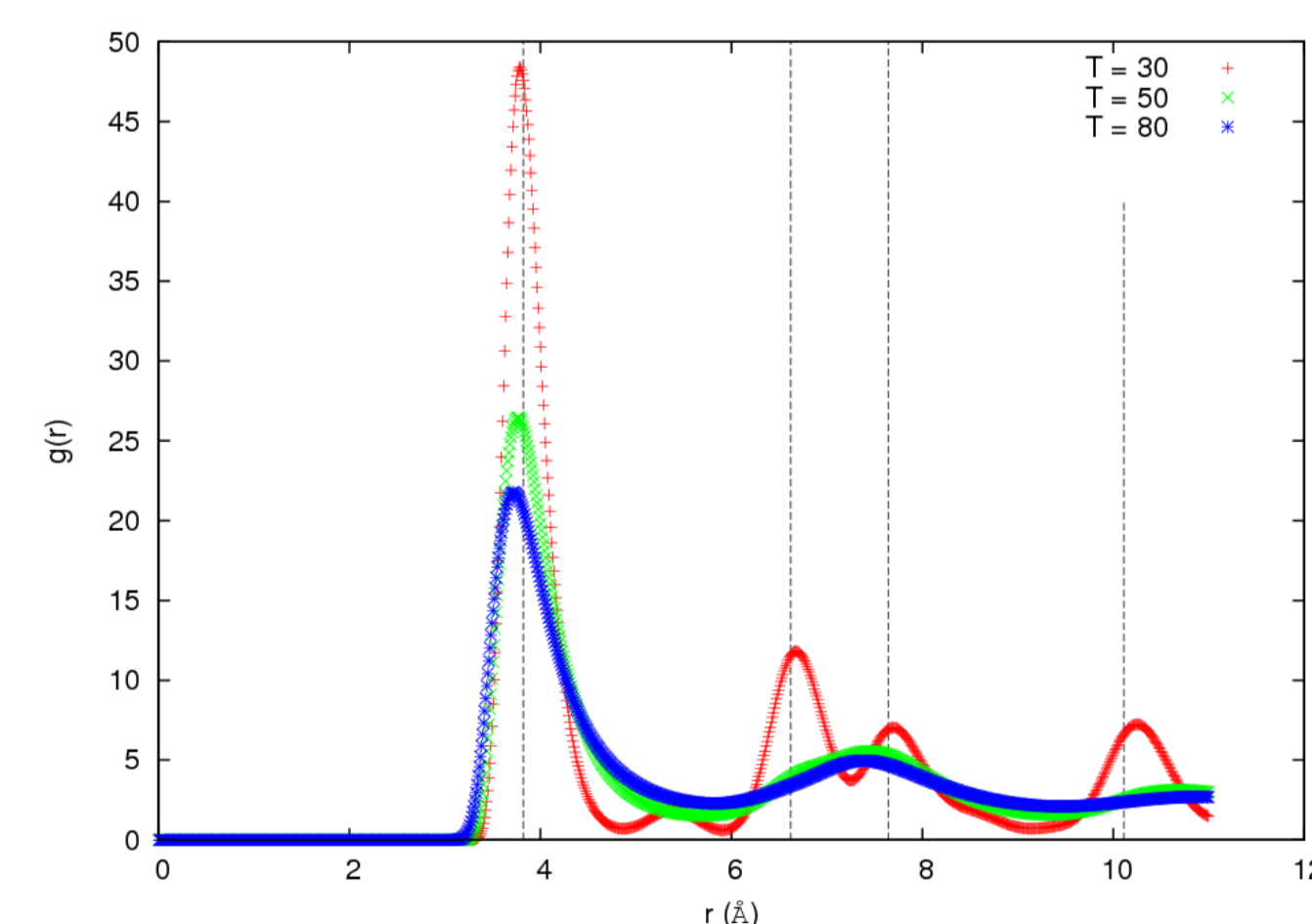


Figura 8: A função $g(r)$ para $\rho = 1,048$ e $T = 30, 50$ e 80 . Em pontilhado, estão os picos esperados em um sistema de Ar bidimensional.

Resultados - Ensemble NVE

O calor isostérico

• Os átomos de Argônio que não foram adsorvidos possuem três graus de liberdade para se movimentarem. Quando um átomo é adsorvido pelo substrato, ele perde um grau de liberdade e passa a

Conclusão

• Estudamos propriedades do sistema Ar-Grafeno para várias densidades e intervalos de temperatura. Isso permitiu uma maior compreensão do fenômeno de adsorção, através de grandezas como a cobertura da folha e o calor isostérico, e também do ordenamento da primeira camada adsorvida, observando a distância média da camada ao substrato e a função radial de distribuição de pares.

Trabalhos Futuros

• Neste trabalho a distância da primeira camada adsorvida e a função $g(r)$ mostram evidências de transições de fase entre sólido e líquido. Pretendemos caracterizar melhor estas transições e comparar com resultados para Ar em grafite [3].

• Nossa atenção esteve voltada para a primeira camada adsorvida. Pretendemos estender esta investigação em situações onde estejam presentes mais do que uma camada. Estamos interessados em saber como estas camadas alteram nossos resultados para a primeira camada, bem como determinar as propriedades destas camadas adicionais.

Agradecimentos

Os autores agradecem a Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de São Paulo pelo apoio financeiro.

Referências

- [1] S. Plimpton, Fast parallel algorithms for short-range molecular dynamics, *J Comp Phys*, 117:1–19, 1995.<http://lammps.sandia.gov>
- [2] Jegan S. Pushparajalingam, Marco Kalweit, Mathieu Labois e Dimitris Drikakis. Molecular dynamics of adsorption of argon on graphene, carbon nanotubes and carbon nanotubes bundles. *Journal of Computational and Theoretical Nanoscience*, 6:2156–2163(8), 2009.
- [3] Flenner, E. and Etters, R. D. Properties of argon adlayers deposited on graphite from Monte Carlo calculations. *Phys. Rev. B*, vol. 73, issue 12, 125419, 2006.