

УДК 538.911

МОДЕЛИРОВАНИЕ ДИФФУЗИИ АТОМА МЕДИ НА ГРАФЕНЕ МЕТОДОМ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ

© 2024 г. С. В. Худяков^{а, *}, С. В. Колесников^а, А. М. Салецкий^а

^аМосковский государственный университет им. М.В. Ломоносова, Москва, 119991 Россия

*e-mail: serhmsu@gmail.com

Поступила в редакцию 12.06.2023 г.

После доработки 28.08.2023 г.

Принята к публикации 28.08.2023 г.

Приведены результаты исследования влияния геометрических и термодинамических параметров термического испарения и осаждения меди на графен, лежащий на поверхности Cu(111), на адсорбцию атомов меди, а также их поверхностную диффузию. Моделирование проводилось методом классической молекулярной динамики с использованием цепочек термостатов Нозе–Гувера. Межатомные взаимодействия определяли с использованием потенциалов Терсоффа–Бреннера, Росато–Жиллопа–Легранда и модифицированного потенциала Морзе. Сформулирован и протестирован простой критерий термализации адатомов на графене, лежащем на поверхности Cu(111). Исследованы средняя длина и среднее время свободного пробега атома меди до и после термализации при низкой (7 К) и комнатной температурах графена для двух температур испарения. Найдена вероятность адсорбции атома меди. Построены распределения по направлениям движения адатомов при равновесной диффузии. Показано, что распределения длины и времени свободного пробега имеют экспоненциальный вид. Исследовано влияние подложки Cu(111) на диффузию атома Cu на графене. Полученные результаты могут быть использованы для моделирования роста нанокластеров меди на графене кинетическим методом Монте–Карло.

Ключевые слова: нанокластеры, графен, муаровая структура, молекулярная динамика, межатомные потенциалы, адсорбция, диффузия, средняя длина свободного пробега, распределение по направлениям.

DOI: 10.31857/S1028096024020077, EDN: BAPGSL

ВВЕДЕНИЕ

Уже два десятилетия изучение графена и связанных с ним наноструктур не теряет актуальности и остается перспективным направлением науки и технологий. Графен — двумерный кристалл углерода с гексагональной решеткой, атомы которого находятся в состоянии sp^2 -гибридизации и связаны между собой σ - и π -связями [1]. В чистом виде графен получен впервые в 2004 г. А.К. Геймом и К.С. Новоселовым [2, 3], за что в 2010 г. им была присуждена Нобелевская премия. Графен обладает рядом замечательных свойств: большой прочностью, электро- и теплопроводностью, оптической прозрачностью, что определяет его широкое практическое применение [4–7]. Наиболее эффективным методом получения графена является химическое осаждение углерода из газовой фазы. Этим методом получены

максимальные по площади слои бездефектного графена [8].

Открытие суперструктур графена при его эпитаксиальном выращивании на различных поверхностях породило значительный интерес к возможности создания на графене систем нанокластеров с высокой степенью упорядочения. Такие системы могут быть использованы для создания элементной базы перспективных вычислительных устройств [9–11]. Так, графен на поверхности Cu(111) обладает муаровой структурой, возникшей вследствие малого различия между периодом решетки графена и минимальным межатомным расстоянием в кристалле меди [12, 13]. Одним из способов практического получения металлических нанокластеров является напыление металлов на графен, лежащий на металлических подложках. Процессами, определяющими рост нанокластеров, являются адсорбция

и дальнейшая диффузия адатомов металлов на суперструктурах графен/металл [14]. В результате экспериментального исследования напыления металлов на эти структуры, а также моделирования с использованием теории функционала плотности получают распределения нанокластеров по величине, форме, ориентации [14–17].

Теоретически процессы роста нанокластеров обычно изучают методом Монте-Карло, поскольку он позволяет осуществлять моделирование на больших временных масштабах. Как правило, при моделировании диффузии адатомов предполагается, что они совершают одиночные прыжки между узлами кристаллической решетки в ближайшие положения равновесия. Однако при комнатной температуре существует вероятность перемещений атомов на более значительные расстояния [18]. Для корректного применения метода Монте-Карло в этом случае необходимо модифицировать алгоритм в зависимости от распределения параметров свободного пробега. Эти параметры можно получить методом молекулярной динамики, принимая во внимание условия напыления.

В настоящей работе изучено влияние геометрических и термодинамических параметров процесса термического испарения и осаждения меди на графен, лежащий на поверхности Cu(111), на адсорбцию атомов меди, а также их поверхностную диффузию. Исследованы средняя длина и среднее время свободного пробега до и после термализации при низкой (7 К) и комнатной температурах. Построены распределения по направлениям движения адатомов при равновесной диффузии, а также по длине и времени свободного пробега.

МЕТОДИКА МОДЕЛИРОВАНИЯ

Для моделирования процессов адсорбции и диффузии атома меди на графене, лежащем на Cu(111), был применен метод классической молекулярной динамики [19]. В этом методе атомы рассматривают как материальные точки, движение которых подчиняется законам классической ньютоновской механики. Силы, действующие на частицы, вычисляют как $\mathbf{F}_i(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) = -\partial V(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N)/\partial \mathbf{r}_i$, где $V(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N)$ – потенциальная энергия взаимодействия атомов.

Постоянную температуру графена и подложки поддерживает цепочка термостатов Нозе–Гувера [20, 21]. Напыляемые атомы меди с термостатом не взаимодействуют. Межатомное взаимодействие в графене задано с помощью потенциала Терсоффа–Бреннера [22], параметры которого заимствованы из [23]. Потенциальная энергия взаимодействия атомов С–С выражается в виде:

$$V_{TB} = \sum_i \sum_{j>i} (V_R(r_{ij}) - \bar{B}_{ij} V_A(r_{ij})), \quad (1)$$

$$V_R(r_{ij}) = \frac{D^{(e)}}{S-1} \exp\left(-(2S)^{1/2} \beta(r_{ij} - R^{(e)})\right) f_c(r_{ij}), \quad (2)$$

$$V_A(r_{ij}) = \frac{D^{(e)}S}{S-1} \exp\left(-(2/S)^{1/2} \beta(r_{ij} - R^{(e)})\right) f_c(r_{ij}), \quad (3)$$

где V_R – потенциальная энергия отталкивания, V_A – потенциальная энергия притяжения, r_{ij} – расстояние между i -ым и j -ым атомами, $f_c(r_{ij})$ – функция обрезания, которая в рассматриваемом случае имеет вид:

$$f_c(r_{ij}) = \begin{cases} 1, & \text{если } r_{ij} < R_{TB}^{(1)}, \\ \frac{1}{2} \left(1 + \cos \left(\frac{\pi(r_{ij} - R_{TB}^{(1)})}{R_{TB}^{(2)} - R_{TB}^{(1)}} \right) \right), & \text{если } R_{TB}^{(1)} \leq r_{ij} \leq R_{TB}^{(2)}, \\ 0, & \text{если } r_{ij} > R_{TB}^{(2)}. \end{cases} \quad (4)$$

Параметр взаимодействия $\bar{B}_{ij} = \frac{1}{2}(B_{ij} + B_{ji})$, где

$$B_{ij} = \left(1 + \sum_{k \neq j} G(\theta_{ijk}) f_c(r_{ik}) \right)^{-\delta}, \quad (5)$$

угловая функция

$$G(\theta_{ijk}) = a_0 \left(1 + \frac{c_0^2}{d_0^2} - \frac{c_0^2}{d_0^2 (1 + \cos \theta_{ijk})^2} \right).$$

Здесь k – номера соседних с i -ым атомов, исключая j -ый, θ – угол между направлениями связей i – j и i – k . Параметры потенциала (1)–(5) приведены в табл. 1.

Таблица 1. Параметры потенциала Терсоффа–Бреннера [23]

$R^{(e)}$, эВ	S	β , Å ⁻¹	$R^{(e)}$, Å	$R_{TB}^{(1)}$, Å	$R_{TB}^{(2)}$, Å	δ	a_0	c_0	d_0
6.325	1.29	1.5	1.315	1.7	2	0.80469	0.011304	19.0	2.5

Таблица 2. Параметры потенциала Росато–Жиллопа–Легранда [25]

A , эВ	ξ , эВ	p	q	$r_{(0)}$, Å	$R_{RGL}^{(1)}$, Å	$R_{RGL}^{(2)}$, Å
0.0854	1.2243	10.939	2.2799	2.5563	6.5	7.5

Взаимодействие между атомами меди задано потенциалом Росато–Жиллопа–Легранда [24] с параметрами, взятыми из [25]:

$$V_{RGL} = \sum_i (E_i^{(R)} + E_i^{(B)}), \quad (6)$$

$$E_i^{(R)} = A \sum_j \exp \left(-p \left(\frac{r_{ij}}{r_0} - 1 \right) \right) f_c(r_{ij}), \quad (7)$$

$$E_i^{(B)} = -\xi \left(\sum_j \exp \left(-2q \left(\frac{r_{ij}}{r_0} - 1 \right) \right) f_c(r_{ij}) \right)^{1/2}, \quad (8)$$

где V_{RGL} — полная потенциальная энергия взаимодействия атомов меди, $E_i^{(R)}$ — потенциальная энергия отталкивания, $E_i^{(B)}$ — потенциальная энергия притяжения, A , ξ , p , q , r_0 — параметры потенциала (6)–(8) (приведены в табл. 2). Функция обрезания $f_c(r_{ij})$ для потенциала Росато–Жиллопа–Легранда была выбрана в таком же виде (5), что и для потенциала Терсоффа–Бреннера, но с большими радиусами (табл. 2).

Наконец, взаимодействие атомов меди и атомов углерода графена моделировали с использованием модифицированного потенциала Морзе [18]:

$$V_{MM} = \sum_i \sum_j D \left(\exp \left(-2\alpha(r_{ij} - r_0) \right) - 2 \exp \left(-\alpha(r_{ij} - r_0) \right) \left| \cos(\varphi_{ij}) \right|^\delta \right) f_c(r_{ij}), \quad (9)$$

где φ_{ij} — угол между нормалью к поверхности графена и радиус-вектором, соединяющим атомы с номерами i и j . Параметры D , r_0 , α , δ из (9) приведены в табл. 3.

Для моделирования графена, лежащего на поверхности Cu(111), использовали вычислительную ячейку 63.9×110.7 Å, содержащую восемь слоев атомов меди (из них два статических), всего в слое 1250 атомов. Количество атомов углерода 2704. Направление “зигзаг” в графене совпадает с направлением [110] в кристалле меди.

РЕЗУЛЬТАТЫ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

Проведено моделирование термического осаждения атома меди на графен, его адсорбции и диффузии. Направление падения атома меди на графен определялось полярным углом θ , отсчитываемым от оси z , и азимутальным углом φ , отсчитываемым на плоскости xy . Начальная скорость напыляемого атома соответствовала средней скорости, которую можно найти из распределения Максвелла для температуры испарения меди. Расчеты проводили для температуры испарения меди $T_{\text{исп}} = 1400$ и 2000 К и температуры графена $T_{\text{гр}} = 7$ и 300 К.

Таблица 3. Параметры модифицированного потенциала Морзе [18]

D , эВ	r_0	α	δ
0.11989	2.05425	1.05000	6.75078

Моделирование включало в себя два этапа: до и после термализации. Для определения момента термализации предложен упрощенный критерий, согласно которому каждая из трех проекций скоростей адатома на оси координат после столкновения с графеном меняет знак на противоположный хотя бы один раз. Тестовые расчеты показали, что при выполнении данного критерия средняя температура адатома и средняя температура подложки становятся одинаковыми, а направление движения адатома перестает зависеть от направления его падения.

При низкой температуре диффузия адатома меди на графене после термализации носит прыжковый характер [18], атом перемещается между соседними узлами кристаллической решетки графена (короткие прыжки). Моделирование при комнатной температуре показало, что атом меди совершает преимущественно длинные прыжки на расстояния, значительно превышающие межатомное расстояние в графене. Это обусловлено тем, что при $T_{\text{гр}} = 300$ К средняя кинетическая энергия атома меди составляет 38 мэВ, что примерно в 20 раз превышает диффузионный барьер для прыжка атома меди на графене (1.8 мэВ) [18]. Траектория адатома в большинстве случаев не проходит через “холмы” муаровой структуры (рис. 1).

При низкой температуре диффузия адатома меди на графене после термализации носит прыжковый характер [18], атом перемещается между соседними узлами кристаллической решетки графена (короткие прыжки). Моделирование при комнатной температуре показало, что атом меди совершает преимущественно длинные прыжки на расстояния, значительно превышающие межатомное расстояние в графене. Это обусловлено тем, что при $T_{\text{гр}} = 300$ К средняя кинетическая энергия атома меди составляет 38 мэВ, что примерно в 20 раз превышает диффузионный барьер для прыжка атома меди на графене (1.8 мэВ) [18]. Траектория адатома в большинстве случаев не проходит через “холмы” муаровой структуры (рис. 1).

На рис. 2а видно, что средняя длина L_1 свободного пробега адатома до термализации монотонно возрастает с увеличением угла θ от 0° до 80° , аналогичное поведение наблюдается и у зависимости среднего времени свободного пробега τ_1 .

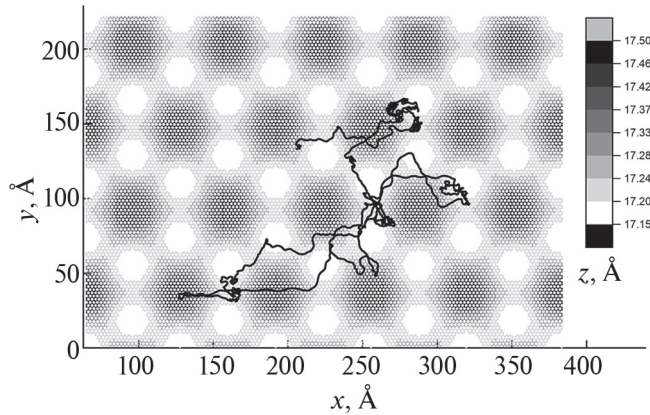


Рис. 1. Траектория движения атома меди на графене на поверхности Cu(111) после термализации, время моделирования методом молекулярной динамики $t_{\text{sim}} = 1$ нс, число шагов $N_{\text{sim}} = 500000$.

При низкой температуре $T_{\text{гр}} = 7$ К аппроксимации средней длины и среднего времени свободного пробега атома меди до термализации имеют вид: $L_1(\theta) = -4.8\theta^3 + 23.64\theta^2 - 6.3\theta + 1.91$; $\tau_1(\theta) = -12\theta^3 + 57.3\theta^2 - 11\theta + 7.9$. При $T_{\text{гр}} = 300$ К $L_1(\theta) = -22.19\theta^3 + 53.84\theta^2 - 9.17\theta + 7.48$; $\tau_1(\theta) = -28.1\theta^3 + 63.4\theta^2 - 13.3\theta + 13.34$. Здесь угол θ измеряется в радианах.

В отличие от свободного графена, в случае графена, лежащего на поверхности Cu(111), при низкой температуре $T_{\text{гр}}$ средние длины свободного пробега до термализации L_1 , и после термализации L не зависят от ϕ . Существенное уменьшение L_1 по сравнению с диффузией на свободном графене при $T_{\text{гр}} = 7$ К показано на рис. 3а, при $T_{\text{гр}} = 300$ К – на рис. 3б. При увеличении температуры $T_{\text{исп}}$ от 1400 до 2000 К при комнатной температуре графена величины L_1 и τ_1 также возрастают. Отметим, что параметр L при комнатной температуре зависит от азимутального угла: $L(\phi) = \cos(6\phi + \pi) + 4.7$ (рис. 2в). Аналогично аппроксимация среднего времени свободного пробега дает $\tau(\phi) = 0.35\cos(6\phi + \pi) + 2.35$.

Распределение средней длины свободного пробега после термализации при комнатной температуре носит экспоненциальный характер: $P(\Delta r) = (1/L)\exp(-\Delta r/L)$. Остальные величины, характеризующие движение атома меди на графене, также подчиняются экспоненциальному распределению: $P(r_1) = (1/L_1)\exp(-r_1/L_1)$; $P(\tau_1) = (1/\tau_1)\exp(-t_1/\tau_1)$; $P(\Delta t) = (1/\tau)\exp(-\Delta t/\tau)$, где r_1 , t_1 , Δr , Δt – начальные и последующие время и смещение.

Вероятность адсорбции немного убывает с увеличением угла θ от 0° до 80° (рис. 2б). Это

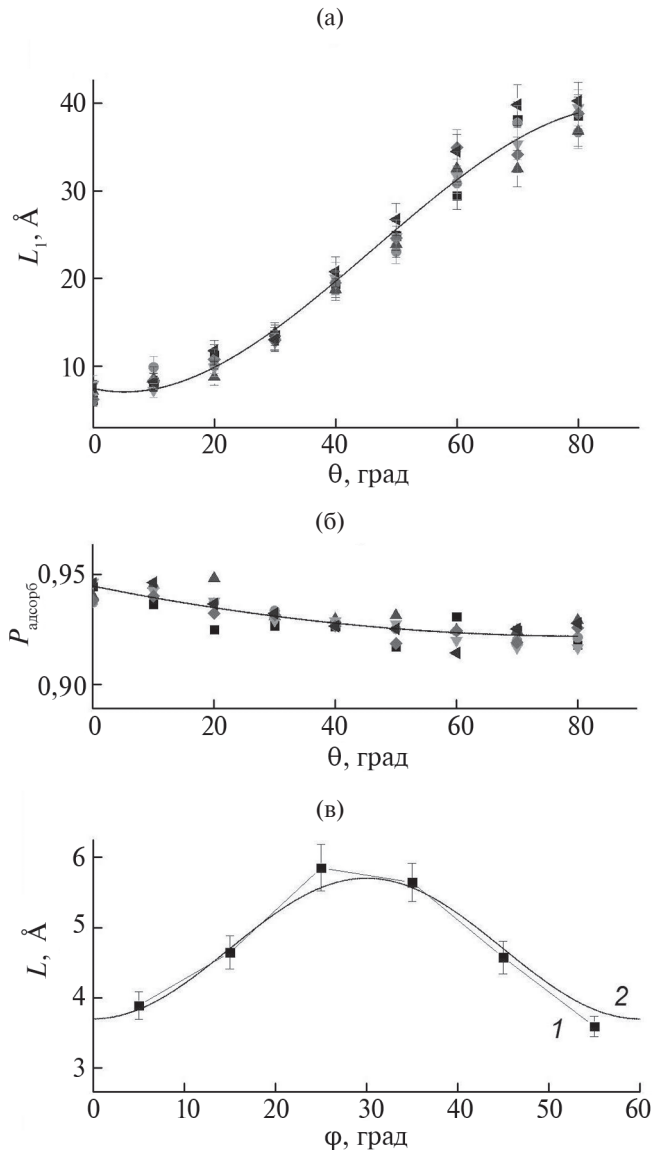


Рис. 2. Зависимость средней длины свободного пробега атома меди до термализации L_1 от полярного угла падения θ и ее аппроксимация $L_1(\theta) = -22.19\theta^3 + 53.84\theta^2 - 9.17\theta + 7.48$ (а); зависимость вероятности адсорбции от θ (аппроксимация $P_{\text{адсорб}}(\theta) = 1.1\theta^2 - 3.2\theta + 0.94$) (б); распределение по углу ϕ средней длины свободного пробега атома меди после термализации L (1) и аппроксимация $L = \cos(6\phi + \pi) + 4.7$, $\theta = 80^\circ$ (2) (в). Во всех случаях $T_{\text{гр}} = 300$ К, $T_{\text{исп}} = 1400$ К. В формулах для аппроксимации углы ϕ , θ выражены в радианах.

связано с тем, что при малых углах θ падающий атом меди может попасть в зону притяжения, локализованную в плоскости графена и вытянутую в перпендикулярном направлении. В этом случае атом испытывает притяжение со стороны графена, и вероятность его отскока мала. В случае падения под наклоном к плоскости графена (т.е. при больших углах θ) атом в процессе дви-

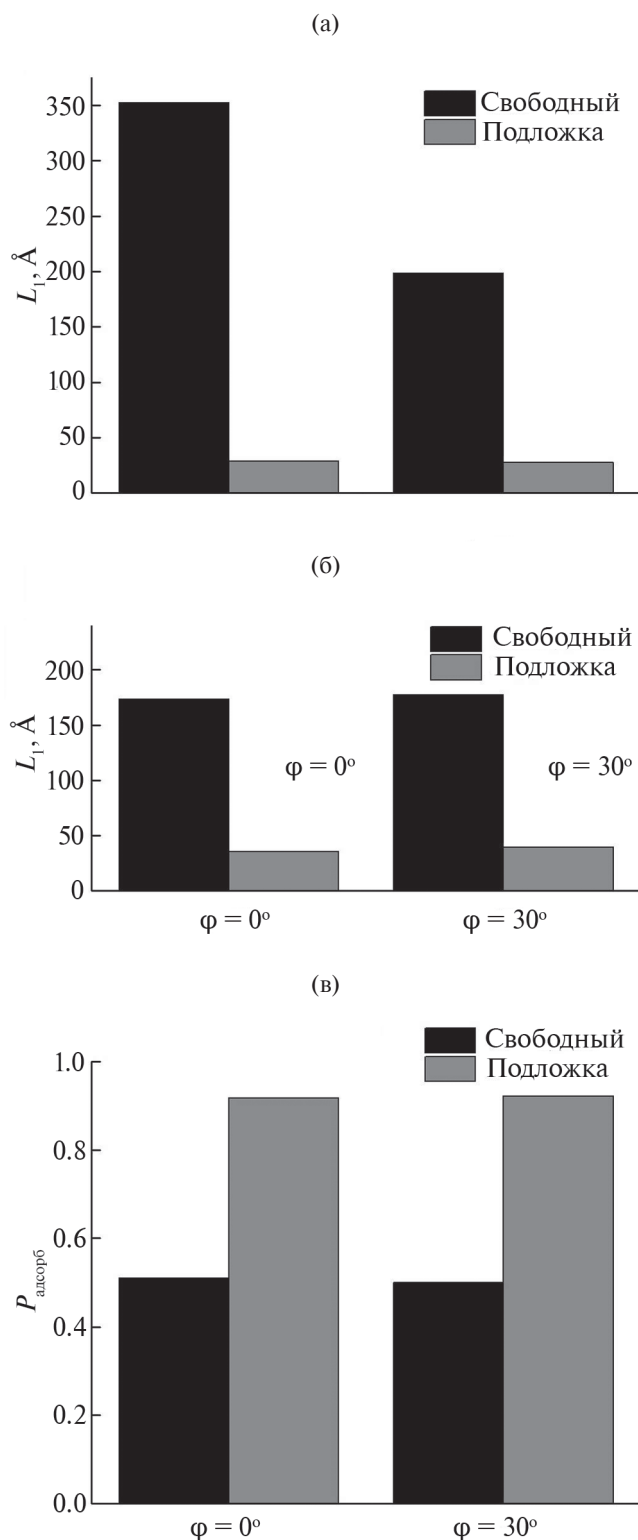


Рис. 3. Зависимость средней длины свободного пробега атома меди до термализации L_1 от угла ϕ при наличии или в отсутствие подложки при $T_{\text{гр}} = 7 \text{ K}$, $T_{\text{исп}} = 1400 \text{ K}$ (а), при $T_{\text{гр}} = 300 \text{ K}$, $T_{\text{исп}} = 1400 \text{ K}$ (б); зависимость вероятности адсорбции от угла ϕ при наличии или в отсутствие подложки при $T_{\text{гр}} = 300 \text{ K}$, $T_{\text{исп}} = 1400 \text{ K}$ (в). Полярный угол падения $\theta = 80^\circ$.

жения будет пересекать как области притяжения, так и области отталкивания, что увеличивает вероятность отскока. Вероятность адсорбции не зависит от азимутального угла ϕ . По сравнению с расчетами для свободного графена вероятность адсорбции атома меди на графене, лежащем на Cu(111), существенно увеличивается (рис. 3в).

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В результате моделирования диффузии атома меди на графене методом молекулярной динамики были получены следующие основные результаты. Во-первых, при диффузии атома меди на графене, лежащем на поверхности меди (111), средняя длина и среднее время свободного пробега уменьшаются примерно на порядок величины, по сравнению с диффузией на свободном графене. Также в несколько раз увеличивается вероятность адсорбции атома меди.

Во-вторых, средняя длина и среднее время свободного пробега атома меди монотонно возрастают с увеличением полярного угла падения на графен. Вероятность адсорбции уменьшается при возрастании полярного угла. Зависимость средней длины и времени свободного пробега после термализации носит осциллирующий характер при комнатной температуре. Максимумы и минимумы этих величин соответствуют направлениям “зигзаг” и “кресло” муаровой структуры графена.

Подчеркнем, что полученные результаты необходимы для построения корректной теоретической модели роста нанокластеров меди на поверхности графена. Например, основываясь на полученных зависимостях средней длины и среднего времени свободного пробега, можно разработать алгоритм моделирования роста нанокластеров в рамках кинетического метода Монте-Карло [26].

БЛАГОДАРНОСТИ

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (грант № 21-72-20034).

Конфликт интересов. Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Wallace P.R. // Phys. Rev. 1947. V. 71. № 9. P. 622. <http://doi.org/10.1103/physrev.71.622>
2. Novoselov K.S., Geim A.K., Morozov S.V., Jiang D., Zhang Y., Dubonos S.V., Grigorieva I.V., Firsov A.A. // Science. 2004. V. 306. P. 666. <http://doi.org/10.1126/science.1102896>

3. *Novoselov K.S., Geim A.K., Morozov S.V., Jiang D., Katsnelson M.I., Grigorieva I.V., Dubonos S.V., Firsov A.A.* // *Nature*. 2005. V. 438. P. 197.
<http://doi.org/10.1038/nature04233>
4. *Castro Neto A.H., Guinea F., Peres N.M.R., Novoselov K.S., Geim A.K.* // *Rev. Mod. Phys.* 2009. V. 81. P. 109.
<http://doi.org/10.1016/j.physrep.2010.07.003>
5. *Vozmediano M.A.H., Katsnelson M.I., Guinea F.* // *Phys. Rep.* 2010. V. 496. № 4–5. P. 109.
<http://doi.org/10.1016/j.physrep.2010.07.003>
6. *Nakhmedov E., Nadimi E., Vedaiei S., Alekperov O., Tatarlar F., Najafov A.I., Abbasov I.I., Saletsky A.M.* // *Phys. Rev. B*. 2019. V. 99. P. 125125.
<http://doi.org/10.1103/PhysRevB.99.125125>
7. *Zheng Zh., Ma Qi., Bi Zh., Barrera S., Liu M.-H., Mao N., Zhang Ya., Kiper N., Watanabe K., Taniguchi T., Kong J., Tisdale W.A., Ashoori R., Gedik N., Fu L., Xu S.-Ya, Jarillo-Herrero P.* // *Nature*. 2020. V. 588. P. 71.
<http://doi.org/10.1038/s41586-020-2970-9>
8. *Zhou H., Yu W.J., Liu L., Cheng R., Chen Y., Huang X., Liu Y., Wang Y., Huang Y., Duan X.* // *Nature Commun.* 2013. V. 4. P. 2096.
<http://doi.org/10.1038/ncomms3096>
9. *Giovannetti G., Khomyakov P.A., Brocks G., Karpan V.M., Brink J., Kelly P.J.* // *Phys. Rev. Lett.* 2008. V. 101. P. 026803.
<http://doi.org/10.1103/PhysRevLett.101.026803>
10. *Lu Z., Wang Ya. Chen J., Wang J., Zhou Ye, Han S.-T.* // *Chem. Rev.* 2020. V. 120. P. 3941.
<http://doi.org/10.1021/acs.chemrev.9b00730>
11. *Karpan V.M., Giovannetti G., Khomyakov P.A., Talana M., Starikov A.A., Zwierzycki M., Brink J., Brocks G., Kelly P.J.* // *Phys. Rev. Lett.* 2007. V. 99. P. 176602.
<http://doi.org/10.1103/PhysRevLett.99.176602>
12. *Sule P., Szendro M., Hwang C., Tapasztó L.* // *Carbon*. 2010. V. 77. P. 1082.
<http://doi.org/10.1016/j.carbon.2014.06.024>
13. *Shi X., Yin Q., Wei Y.* // *Carbon*. 2012. V. 50. P. 3055.
<http://doi.org/10.1016/j.carbon.2012.02.092>
14. *Liu X., Han Y., Evans J.W., Engstfeld A.K., Behm R.J., Tringides M.C., Hupalo M., Lin H.-Q., Huang L., Ho K.-M., Appy D., Thiel P.A., Wang C.-Z.* // *Progress Surf. Sci.* 2015. V. 90. P. 397.
<http://doi.org/10.1016/j.progsurf.2015.07.001>
15. *Soy E., Liang Z., Trenary M.* // *J. Phys. Chem. C*. 2015. V. 119. № 44. P. 24796.
<http://doi.org/10.1021/acs.jpcc.5b06472>
16. *Soy E., Guisinger N., Trenary M.* // *J. Phys. Chem. B*. 2018. V. 122. № 2. P. 572.
<http://doi.org/10.1021/acs.jpcc.7b05064>
17. *Takahashi K.* // *2D Materials*. 2014. V. two. № 1. P. 014001.
<http://doi.org/10.1088/2053-1583/2/1/014001>
18. *Колесников С.В., Сидоренков А.В., Салецкий А.М.* // *Письма в ЖЭТФ*. 2020. Т. 111. Вып. 2. С. 101.
<http://doi.org/10.31857/S0370274X20020095>
19. *Schlick T.* *Molecular Modeling and Simulation*. Springer, 2002.
20. *Hoover W.G.* // *Phys. Rev. A*. 1985. V. 31. № 3. P. 1695.
<http://doi.org/10.1103/PhysRevA.31.1695>
21. *Martina G.J., Tuckerman M.E., Tobias D.J., Klein M.L.* // *Mol. Phys.* 1996. V. 87. № 5. P. 1117.
<http://doi.org/10.1080/00268979600100761>
22. *Tersoff J.* // *Phys. Rev. B*. 1988. V. 37. № 12. P. 6991.
<http://doi.org/10.1103/PhysRevB.37.6991>
23. *Brenner D.W.* // *Phys. Rev. B*. 1990. V. 42. № 15. P. 9458.
<http://doi.org/10.1103/PhysRevB.42.9458>
24. *Rosato V., Guillope M., Legrand B.* // *Philos. Mag. A*. 1989. V. 59. № 2. P. 2321.
<http://doi.org/10.1080/01418618908205062>
25. *Negulyaev N.N., Stepanyuk V.S., Bruno P., Diekhoner L., Wahl P., Kern K.* // *Phys. Rev. B*. 2008. V. 77. P. 125437.
<http://doi.org/10.1103/PhysRevB.77.125437>
26. *Колесников С.В., Салецкий А.М., Докукин С.А., Клавсюк А.Л.* // *Математическое моделирование*. 2018. Т. 30. № 2. P. 48.
<http://doi.org/10.1134/S2070048218050071>

Simulation of the Diffusion of Copper Atom on Graphene by Molecular Dynamics

S. V. Khudyakov^{1, *}, S. V. Kolesnikov¹, A. M. Saletsky¹

Lomonosov Moscow State University, Moscow, 119991 Russia

**e-mail: serhmsu@gmail.com*

The results of studying the effect of geometric and thermodynamic parameters of thermal evaporation and copper deposition on graphene lying on the Cu(111) surface on the adsorption of copper atoms, as well as their surface diffusion, are presented. The simulation was carried out by classical molecular dynamics using chains of Nose–Hoover thermostats. Interatomic interactions were determined by the Tersoff–Brenner, Rosato–Gillop–Legrand, and modified Morse potentials. A simple criterion for the thermalization of adatoms on graphene lying on a Cu(111) surface was formulated and tested. The average length and mean time of free path of a copper atom before and after thermalization at low (7 K) and room temperatures were studied for two evaporation temperatures. The probability of adsorption of a copper atom was found. The distributions along the directions of motion of adatoms during equilibrium diffusion were constructed. The distributions of the free path length and time were shown to have an exponential form. The influence of the Cu(111) substrate on the diffusion of the Cu atom on graphene was studied. The results obtained can be used to simulate the growth of copper nanoclusters on graphene by the kinetic Monte Carlo method.

Keywords: nanoclusters, graphene, moiré structure, molecular dynamics, interatomic potentials, adsorption, diffusion, mean free path, directional distribution.