

Supplementary Material

Технические подробности DFT-расчетов

В качестве моделей наногибридных систем графен- C_{60} использовались суперячейки, включающие молекулу фуллерена C_{60} (или его фрагмента) и лист графена, состоящий из 36 примитивных ячеек (6×6). Параметры гексагональной ячейки в плоскости графена составляли $a = b = 14.76 \text{ \AA}$, параметр c выбирался таким образом, чтобы расстояние между верхними атомами фуллерена и следующей трансляцией графена вдоль оси z (перпендикулярно плоскости графена) оказалось не менее 12 \AA . Перед процедурой оптимизации, и составлял 22 \AA . Для исключения влияния потенциала соседних трансляций суперячейки в направлении z на атомы системы, в процессе самосогласованного расчета применялась процедура исключения кулоновского взаимодействия между этими трансляциями согласно [20], в плоскости графена элементарная суперячейка периодически транслировалась, таким образом рассчитываемая система являлась чисто двумерной.

Были выполнены самосогласованные расчеты полной энергии на основе теории функционала электронной плотности (DFT-PBE) с использованием приближения псевдопотенциала [14,15]. Использовались ультрамягкие псевдопотенциалы в параметризации Вандербиля [21], для углерода использовалась следующая электронная конфигурация: $C-[He]2s22p^2$, с замороженным остовом и 4 валентными электронами. В случае системы с фрагментом фуллерена в некоторых случаях для улучшения сходимости самосогласованного расчета использовалась водородная пассивация краевых атомов углерода (Рис. 1b), которая практически не оказывала влияния на результаты структурной оптимизации и энергетический спектр в окрестности уровня Ферми. Максимальная энергия плоских волн, используемых для разложения псевдодолговых функций, составляла 354 эВ , для интегрирования электронной плотности по плоской зоне Бриллюэна в самосогласованном расчете использовались сетки специальных точек [22] в обратном пространстве размерностью $6 \times 6 \times 1$, для расчета полных и парциальных плотностей состояний использовались сетки размерностью $9 \times 9 \times 1$.

Была проведена процедура полной структурной оптимизации моделируемых систем, критерием достижения равновесия системы считалось равенство суммы всех сил, действующих на атомы системы, величине 0.03 эВ/\AA . Для учета вандерваальсового взаимодействия в наногибридной системе графен- C_{60} использовалась дисперсионная поправка к обменно-корреляционной энергии (PBE-D3) [16]. Как показали многочисленные расчеты графеновых интерфейсов и слоистых углеродных структур [16], а также наши тестовые расчеты для графитоподобного углерода и графена, дисперсионная поправка DFT-D3 точнее описывает энергию межслоевого взаимодействия по сравнению с приближением DFT-D2 на величину порядка 10% благодаря учету трехчастичных вкладов в дисперсионный член.

Энергия адсорбции молекулы фуллерена и его фрагмента на листе графена определялась из соотношения:

$$E_{\text{ads}} = (E_{C_{60}+G} - E_{C_{60}} - E_G), \quad (1)$$

где $E_{C_{60}+G}$ — полная энергия суперячейки, $E_{C_{60}}$ — энергия молекулы фуллерена, E_G — энергия листа графена.

Литература/References

20. T. Sohler, M. Calandra, F. Mauri. Phys. Rev. B. 96, 075448 (2017). [Crossref](#)
21. D. Vanderbilt. Phys. Rev. B. 41, 7892 (1990). [Crossref](#)
22. H. Monkhorst, J. Pack. Phys. Rev. B. 13, 5188 (1976). [Crossref](#)