

# Динамика плоской солитонной волны сжатия в наноленте графена

Савин А.В.<sup>1</sup>, Кившарь Ю.С.<sup>2</sup>

E-mail: asavin00@gmail.com

<sup>1</sup>Институт Химической Физики РАН, ул. Косыгина, 4, 119991 Москва

<sup>2</sup>Центр нелинейной физики, Исследовательская школа физических наук и технологий,  
Австралийский национальный университет, Канберра, АСТ 0200, Австралия

## Dynamics of planar soliton waves in graphene nanoribbons

Savin A.V.<sup>1</sup>, Kivshar Yu.S.<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Semenov Institute of Chemical Physics RAS, 119991 Moscow

<sup>2</sup>Nonlinear Physics Center, Research School of Physical Sciences and Engineering,  
Australian National University, Canberra, ACT 0200, Australia

Показано, что в листе графена возможно распространение плоских уединенных волн продольного сжатия, имеющих узкий интервал сверхзвуковых скоростей. В бесконечном листе фронт уединенной волны движется с постоянной сверхзвуковой скоростью сохраняя свою форму, причем взаимодействие таких солитонных плоских волн происходит упруго без потери энергии на излучение фононов. Однако в наноленте графена конечной ширины, на краях наноленты происходит интенсивное излучение фононов приводящее к быстрому разрушению фронта волны. Время жизни плоской солитонной волны зависит от ширины наноленты - солитонная волна имеет конечную длину пробега примерно равную удвоенной ширине наноленты.

**Ключевые слова:** нанолента, графен, акустический солитон.

It is demonstrated that planar solitary waves of the longitudinal compression can propagate in a graphene sheet with supersonic velocities from a narrow range. In an infinite sheet, such a solitary wave does not change its shape, and interaction between two solitary waves is elastic with no energy loss for radiation. However, in a graphene nanoribbon the solitary waves are affected by the nanoribbon edges which stipulate the phonon emission. As a result, the soliton lifetime becomes finite, and it is roughly equal to the double width of the nanoribbon.

**Keywords:** Graphene nanoribbon, acoustic soliton.

### 1. Введение

В последнее время проводятся интенсивные исследования механических и физических свойств листов и протяженных нанолент графена. Особый интерес вызывает возможность существования локализованных солитонных возбуждений. В данной работе будет показано, что структура графена допускает существование плоских уединенных волн сжатия, обладающих солитонными свойствами. В наноленте графена, имеющей конечную ширину, такая солитонная волна имеет конечное время жизни из-за её взаимодействия с краями наноленты.

Ранее возможность существования уединенных волн рассматривалась для одностенных углеродных нанотрубок. В [1, 2] показано, что в континуальном приближении нелинейная динамика нанотрубки может быть описана уравнением Кортевега-де Фриза и поэтому могут существовать сверхзвуковые продольные солитоны сжатия. Более детальный анализ [3] показал, что данные

решения не являются точными. В нанотрубке могут существовать только солитоноподобные возбуждения, сверхзвуковое движение которых всегда сопровождается излучением фононов (излучение обусловлено кривизной поверхности нанотрубки).

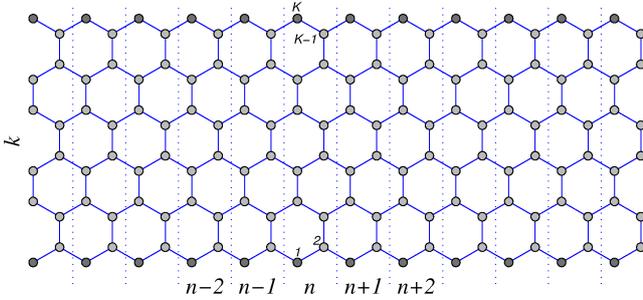
С другой стороны в плоской молекулярной решетке могут существовать сверхзвуковые уединенные плоские волны сжатия, являющиеся точными решениями дискретной системы уравнений [4]. Структура плоского слоя графена тоже допускает существование таких решений [3]. Возникает естественный вопрос могут ли существовать такие солитонные волны сжатия в плоских нанолентах графена, принципиальной особенностью которых является наличие свободных краев.

### 2. Описание модели

Графеновая нанолента (GRN) представляет собой ленту постоянной ширины вырезанную из одного плоского

листа графена. Свойства такой ленты зависят от её ширины и хиральности. Для определенности мы рассмотрим динамику продольной солитонной волны в наноленте со структурой зигзаг - см. рис. 1.

Структуру идеальной ленты можно представить как результат последовательного продольного сдвига на период ленты ее элементарной ячейки. Как хорошо видно из рис. 1 число атомов углерода в элементарной ячейке GRN зигзаг  $K \geq 4$  и всегда кратно 2.



**Рис. 1.** Схематический вид графеновой наноленты со структурой зигзаг. Показана использованная нумерация атомов. Краевые атомы показаны более темным цветом. Точечные линии разделяют элементарные ячейки наноленты, K - число атомов в элементарной ячейке.

Пронумеруем атомы в элементарной ячейке как показано на рисунке. Тогда каждый атом углерода наноленты будем нумеровать двухкомпонентным индексом  $\alpha=(n,k)$ , где  $n=0,\pm 1,\pm 2,\dots$  задает номер элементарной ячейки, а  $k=1,2,\dots,K$  - номер атома в ячейке. Каждая элементарная ячейка имеет 2 краевых атома углерода (на рис. 1 краевые атомы показаны более темным цветом). Эти атомы всегда химически модифицированы [5, 6], это могут быть группы атомов CH, CH<sub>2</sub>, CON, СНОН.

В данной работе мы не будем учитывать специфику химической модификации краевых атомов наноленты, а учтем только изменение вследствие модификации эффективной массы краевых атомов углерода. Поэтому в используемой модели GNR атомы углерода внутри ленты имеют обычную массу  $M_0 = 12m_p$ , а краевые атомы - большее значение массы  $M_1 = 13m_p, 14m_p, 29m_p, 30m_p$  ( $m_p = 1.6603 \cdot 10^{-27}$  kg - масса протона).

Мы рассмотрим плоскую динамику наноленты, когда все её атомы находятся в одной плоскости. В этом случае гамильтониан системы может быть записан в форме,

$$H = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \sum_{k=1}^K \left[ \frac{1}{2} M_{n,k} (u_{n,k}, u_{n,k}) + P_{n,k} \right], \quad (1)$$

где  $M_\alpha$  - масса атома углерода с векторным индексом  $\alpha = (n, k)$  (для внутренних атомов  $M_\alpha = M_0$ , для краевых атомов  $M_\alpha = M_1 > M_0$ ),  $u_\alpha = (x_\alpha(t), y_\alpha(t))$  -- вектор задающий положение  $\alpha$ -того атома углерода в момент времени  $t$ . Последний член  $P_\alpha$  описывает взаимодействие атома углерода  $\alpha$  с его соседями. Для описания плоской динамики достаточно только учесть

энергии деформации валентных связей и валентных углов.

Мы воспользуемся стандартным набором потенциалов метода молекулярной динамики. Валентную связь между соседними атомами углерода  $\alpha$  и  $\beta$  опишем потенциалом

$$U_1(u_\alpha, u_\beta) = \varepsilon_1 \{ \exp[-\alpha_0(\rho - \rho_0)] - 1 \}^2, \\ \rho = |u_\alpha - u_\beta|,$$

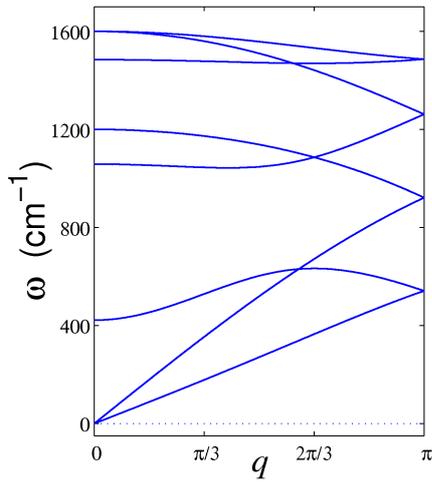
где  $\varepsilon_1 = 4.9632$  эВ - равновесная энергия, а  $\rho_0 = 1.418 \text{ \AA}$  - равновесная длина валентной связи. Энергию деформации валентного угла между соседними атомами углерода  $\alpha, \beta, \gamma$  опишем потенциалом  $U_2(u_\alpha, u_\beta, u_\gamma) = \varepsilon_2 (\cos \phi - \cos \phi_0)^2$ , где  $\cos \phi = (u_\gamma - u_\beta, u_\alpha - u_\beta) / (|u_\gamma - u_\beta| \cdot |u_\alpha - u_\beta|)$ , равновесное значение валентного угла  $\phi_0 = 2\pi/3$ . Значения параметров  $\alpha_0 = 1.7889 \text{ \AA}^{-1}$  и  $\varepsilon_2 = 1.3143$  эВ находятся из частотного спектра малоамплитудных колебаний листа графита [7]. Детальное обоснование выбора значений параметров потенциалов для графена дано в [8].

### 3. Плоская солитонная волна сжатия

Для получения плоской солитонной волны рассмотрим наноленту с периодическими граничными условиями по второму (поперечному) индексу  $k$ . Для этого удобно взять число атомов в элементарной ячейке  $K$  кратным 4, все массы  $M_\alpha = M_0$  и считать, что при  $k > K$  координата  $u_{n,k} = u_{n,k-K} - h_y$ , а при  $k < 1$   $u_{n,k} = u_{n,k+K} + h_y$ . В положении равновесия все атомы наноленты находится в одной плоскости, все валентные связи имеют равновесную длину  $\rho = \rho_0$ , а все валентные углы - равновесное значение  $\phi = 2\pi/3$ . Нанолента имеет продольный период  $h_x = \sqrt{3}\rho_0$  и поперечный период  $h_y = 3\rho_0 K/4$ .

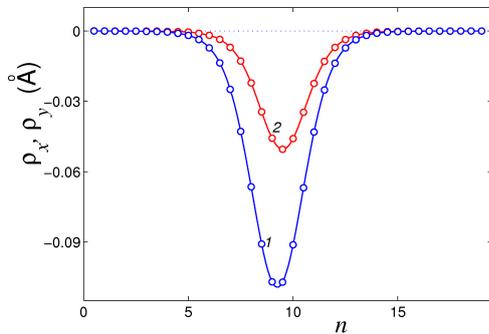
Так как элементарная ячейка наноленты состоит из  $K$  атомов, то дисперсионная кривая системы будет состоять из  $2K$  кривых - см. рис. 2. Из нулевой точки выходит две кривые, первая кривая соответствует плоской волне поперечных смещений, вторая - плоской волне продольных смещений атомов листа графена. Наклон этих кривых задает скорость длинноволновых поперечных  $v_t = 7760$  м/с и продольных  $v_l = 15900$  м/с фононов графена.

Численное исследование системы нелинейных уравнений соответствующих гамильтониану наноленты (1) показало, что в бесконечной плоскости графена существуют только плоские уединенные волны продольного сжатия, имеющие конечный сверхзвуковой интервал



**Рис. 2.** Вид дисперсионных кривых зигзаг наноленты графена с периодическими граничными условиями по  $y$  (число атомов в элементарной ячейке  $K=4$ ).

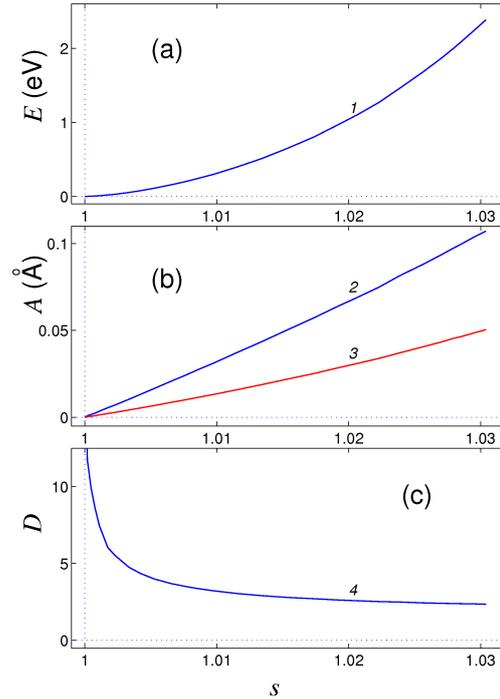
безразмерных скоростей  $1 < s = v/v_l < s_1 = 1.0304$ . В области локализации солитона происходит уменьшение продольного шага решетки сопровождаемое сжатием поперечных валентных связей. Сжатие по продольной компоненте  $\rho_x(n) = x_{n,1} + h_x/2 - x_{n,2}$ ,  $\rho_x(n+1/2) = x_{n,2} + h_x/2 - x_{n+1,1}$  и сжатие поперечных валентных связей  $\rho_y(n) = y_{n,1} + 3\rho_0 - y_{n,4}$ ,  $\rho_y(n+1/2) = y_{n,3} - y_{n,2}$  ( $x_{n,k}$  и  $y_{n,k}$  - координаты атома  $(n, k)$ ) имеет колоколообразный вид уединенной волны (см. рис. 3).



**Рис. 3.** Профиль плоской солитонной волны продольного сжатия. Кривая 1 соответствует продольному сжатию  $\rho_x(n)$ , кривая 2 - сжатию поперечных валентных связей  $\rho_y(n)$ . Безразмерная скорость волны  $s = 1.0304$ .

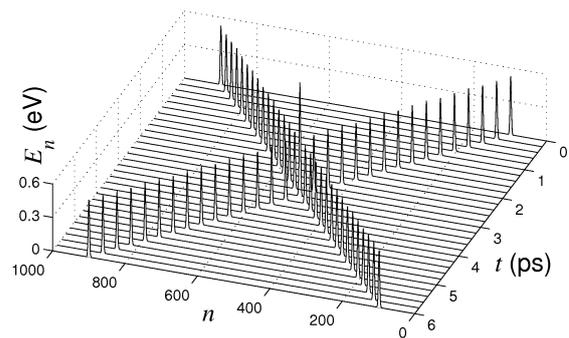
Солитонная волна характеризуется энергией  $E$ , амплитудой продольного сжатия  $A_x = -\min \rho_x(\xi)$ , амплитудой сжатия поперечных связей  $A_y = -\min \rho_y(\xi)$ . Безразмерную ширину солитона можно определить как  $D = 1 + \int |\xi - \xi_0| p(\xi) d\xi$ , где центр солитона  $\xi_0 = \int \xi p(\xi) d\xi$ , плотность распределения энергии вдоль волны  $p(\xi) = E(\xi)/E$ . Зависимость энергии  $E$ , амплитуд сжатия  $A_x, A_y$ , ширины солитонной волны от её безразмерной скорости  $s = v/v_l$  показана на рис. 4. Энергия и амплитуды волны монотонно растут с увеличением скорости, а ширина - монотонно уменьшается. При максимальной скорости  $s = s_1$  (рис. 3) солитон

имеет достаточно гладкий (континуальный) профиль, т.е. при всех скоростях солитон может быть с достаточной точностью описан в континуальном приближении.



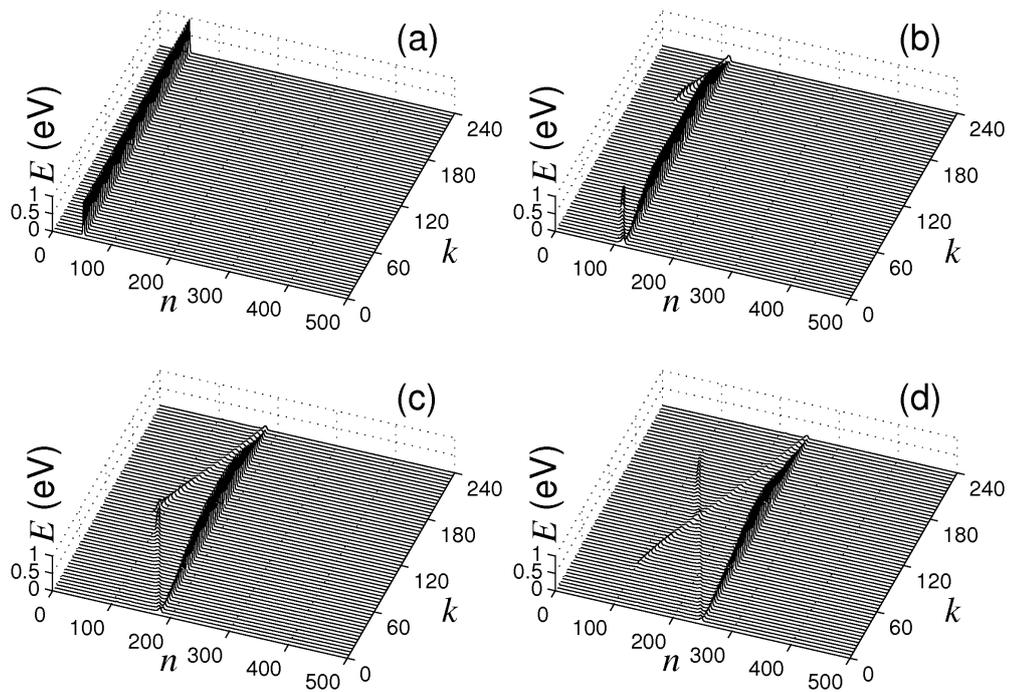
**Рис. 4.** Зависимость энергии  $E$  (кривая 1), амплитуд сжатия  $A_x$  и  $A_y$  (кривые 2 и 3), безразмерной ширины  $D$  (кривая 4) плоской солитонной волны продольного сжатия листа графена от её безразмерной скорости  $s = v/v_l$ .

Численное моделирование солитонной волны сжатия в наноленте с периодическими граничными условиями по  $k$  показало, что при всех значениях безразмерной скорости  $1 < s < s_1$  плоские солитонные волны устойчивы. Они движутся с постоянной скоростью и полностью сохраняют свою форму. Взаимодействие волн происходит упруго, без излучения фононов - см. рис. 5.



**Рис. 5.** Столкновение двух плоских солитонных волн в листе графена. Показана зависимость от времени  $t$  продольного распределения энергии  $E_n$ . Безразмерная скорость волн  $s = 1.03$ .

Таким образом, система уравнений движения, соответствующая наноленте с периодическими краевыми условиями, допускает точное солитонное решение описывающее сверхзвуковое движение плоской уединенной волны слоя графена. Возникает естественный вопрос о возможности движения такой волны в наноленте со свободными краями.



**Рис. 6.** Распад уединенной плоской волны сжатия в углеродной наноленте ширины 25.5 nm ( $K=240$ ). Начальная безразмерная скорость волны  $s=1.03$ . Показано распределение в наноленте энергии  $E$  в момент времени  $t=0$  (a),  $t=1$  ps (b),  $t=2$  ps,  $t=3$  ps (d).

#### 4. Движение солитонной волны сжатия в наноленте графена

Рассмотрим углеродную наноленту структуры зигзаг. Для определенности возьмем массу краевых атомов углерода  $M_1 = 13m_p$ , что соответствует краевой группе атомов СН. Рассмотрим систему уравнений движения, соответствующую гамильтониану наноленты (1). Возьмем начальное условие, соответствующее сверхзвуковой плоской уединенной волне продольного сжатия графена вдоль направления зигзага и промоделируем динамику этой волны в наноленте.

Динамика плоской солитонной волны сжатия вдоль наноленты ширины 25.5 nm показана на рис. 6. Как видно из рисунка, при движении плоской волны с краев наноленты происходит интенсивное излучение фононов, в результате которого края солитонного фронта быстро разрушаются. Фронт волны остается прямым, но энергия из центра фронта быстро уходит на его края, где тратится на излучение фононов. Таким образом, наблюдается эффект сильного «трения» солитонного фронта о края наноленты. Сохранение прямого фронта волны связано с тем, что её скорость слабо отличается от скорости звука, поэтому на временах существования фронта искривление ещё не наблюдается. Сила «трения» не зависит от скорости волны - при любых допустимых сверхзвуковых значениях скорости разрушение фронта происходит по одинаковому сценарию за одно и тоже время. Время жизни солитонного фронта определяется шириной наноленты - длина пробега солитонного фронта примерно равна удвоенной ширине наноленты.

#### 5. Заключение

Проведенное исследование показывает, что структура плоского листа графена допускает существование плоских солитонных волн продольного сжатия, имеющих узкий интервал сверхзвуковых скоростей. В бесконечном листе уединенная волна сжатия движется с постоянной сверхзвуковой скоростью, сохраняя свою форму. Ситуация резко меняется если уединенная волна движется вдоль наноленты конечной ширины. Здесь на краях наноленты происходит интенсивное излучение фононов, приводящее к разрушению с краев фронта волны. Время жизни солитонной волны сжатия (период ее полураспада) зависит от ширины наноленты - чем шире нанолента, тем больше длина пробега солитонной волны.

#### Литература

1. T.Yu. Astakhova, O.D. Gurin, M. Menon, and G.A. Vinogradov. Phys. Rev. B 64, 035418 (2001).
2. T.Yu. Astakhova, M. Menon, and G.A. Vinogradov. Phys. Rev. B 70, 125409 (2004).
3. A.V. Savin and O.I. Savina. Fizika tverdogo tela 46(2) 372 (2004) (in Russian). Physics of the Solid State, 46(2) 383 (2004).
4. Y. Zolotaryuk, A.V. Savin, and P.L. Christiansen. Phys. Rev. B, 57(22) 14213 (1998).
5. G. Lee and K. Cho. Phys. Rev. B 79, 165440 (2009).
6. D.W. Boukhvalov and M.I. Katsnelson. Nano Letters 8, 4373 (2008).
7. A.V. Savin and Yu.S. Kivshar, EPL 82, 66002 (2008).
8. A.V. Savin, Y.S. Kivshar, and B. Hu. Phys. Rev. B 82, 195422 (2010).