

Сведения о выполненных работах
в период с 01.07.2019 г. по 30.06.2020 г.

по проекту **«Исследование гиродинамического излучения нагретых фуллеренов в составе фуллерита, имеющих дипольный момент, под действием стационарного магнитного поля»**,
поддержанному Российским научным фондом

Соглашение № 19-71-10049

Руководитель: канд. физ.-мат. наук Бубенчиков Михаил Алексеевич

В ходе выполнения начальных этапов исследования были разработаны современные математические модели конструкции молекулярных кристаллов, построенных из различных узлов, представляющих собой фуллерены (C₂₄-C₈₀), цианофуллерены (C₂₄H₂₄), высокомолекулярные соединения бора (B₄₂) и пр, а также разработаны модели молекулярной динамики узлов молекулярных кристаллов в условиях свободного теплового движения, вынужденного движения ионизированных узлов под действием электромагнитного поля, и наконец, молекулярно-кинетического взаимодействия с набегающими атомами газообразной среды. Математические модели строились на основе следующих классических методов молекулярной динамики. Подход потенциалов межмолекулярного взаимодействия осуществлялся с использованием модифицированного потенциала Леннарда-Джонса, потенциалов REBO, IREBO, вместе с подходом атом-атомного взаимодействия Хилла-Китайгородского. Уравнения движения строились в соответствии с подходом Гамильтона для движения центров масс частиц и подходом Эйлера при построении уравнений вращательного движения фуллеренов как упругих сфер (динамические уравнения Эйлера + кинематические соотношения для связи проекций моментов подвижной системы координат с главной системой через направляющие косинусы), использовались основные положения термодинамики и статистической физики, учитывалось распределение Максвелла по скоростям. Обоснование применимости методов классической механики было выполнено на основе положений квантовой механики с оценкой соответствующих частицам длин волн Дебройля. Уравнения движений, как ОДУ были аппроксимированы конечными разностями и решены с помощью схемы Рунге-Кутты высокого порядка точности (4-го или 8-го) с шагом по времени – одна фемтосекунда напрямую, а реализованы в виде численного алгоритма в среде разработчика Microsoft Visual Studio 2010 – fortran compiler 90. Были определены моменты инерции этих узлов простым суммированием по атомам. Уравнения в частных производных решались с помощью метода Гаусса-Зейделя с точностью сходимости итерационного процесса – 1 пикометр. Статистика задач молекулярной баллистики набиралась в соответствии с методом Монте-Карло. Взаимодействие электромагнитного поля и ионов описывалось обобщенной силой Лоренца. Оценивалась деформация электронных орбиталей полем. На основе построенных математических моделей и численных схем, были созданы программные алгоритмы и проведено компьютерное моделирование поставленных в техническом задании проекта проблем, с верификацией (там, где это возможно) на

экспериментальных данных находящихся в открытой печати а также 0-тестах и тестах на физическую достоверность. В ходе компьютерного моделирования были получены следующие результаты.

Исследованы фуллеритоподобные структуры, составленные из всех известных на сегодняшний день фуллеренов из ряда от C24 до C80. Исследованы столбчатые структуры B42 и цианофуллериты C24N24. Обнаружена динамическая диссоциация кристаллов некоторых видов фуллеренов, при скоростях вращения (10^{10} - 10^{12} Гц) соответствующих нормальным условиям (300 К), что позволяет сделать вывод о том, что фуллеритоподобные структуры могут быть получены только из некоторых фуллеренов, обладающих высокой степенью симметрии, подобно сферическим фуллеренам C60/C70.

На основании построенной математической модели распределения поля сил межмолекулярного взаимодействия порождаемого узлами молекулярного кристалла фуллерита в соответствии с минимизацией энергии взаимного положения, а также подходом симметричности и минимизации свободного пространства Китайгородского, были получены виртуальные кристаллические решетки различных молекулярных кристаллов в нейтральном и поляризованном состоянии. Оказалось, что 2 разноименно заряженных (с электрическим зарядом равном заряду электрона) соседних узла имеют энергию связи на 15% большую в сравнении с нейтральным фуллеритом. В случае молекулярного кристалла фуллерита высокотемпературной фазы с гранецентрированной кристаллической решеткой энергия взаимодействия узла с первым эшелом узлов, его окружающих становится больше в 2,5 раза больше по отношению к нейтральному фуллериту. Таким образом, можно говорить о значительном упрочнении молекулярного кристалла вследствие поляризации.

Исследована молекулярная динамика узлов молекулярных кристаллов - нейтральных и имеющих связанный заряд на поверхности под действием электромагнитного поля. В нейтральных узлах получен броуновский характер вращения в полном соответствии с экспериментальными данными, однако, в узлах имеющих связанный заряд на поверхности (e^- на одной из вершин фуллерена) были получены регулярные режимы вращения при следующих параметрах $B = 1$ Тл, $E = 100$ кВ/м в импульсном режиме с частотами, лежащими в диапазоне от 1 до 1000 ГГц. Таким образом, при нормальных условиях (300 К) были получены характерные времена релаксации возмущений движения, а также время вывода от броуновского до регулярного вращательного движения порядка 1 нс.

На основе полученных регулярных режимах вращения обнаружены гироскопические явления, возникающие во вращающихся узлах молекулярных кристаллов. Результаты расчетов гироскопических эффектов одиночного фуллерена показали, что при взаимодействии набегающей частицы с вращающимся фуллереном наблюдается прецессионное движение. Масса частицы, оказывающей воздействие на молекулу фуллерена, сильно влияет на его прецессионные характеристики. Получено, что смещение фуллерена из своего начального положения зависит от выбора

начальной угловой скорости и ориентации оси вращения. С помощью такого выбора можно как уменьшить на 7.9%, так и увеличить на 5.44% смещение фуллерена C₆₀ по сравнению со случаем $\omega_0 = 0$ рад/нс. Наименьшее отклонение фуллерена C₆₀ (на 7,9 %) получено при угловой скорости 100 рад/нс и оси вращения, ориентированной вдоль оси O_y, наибольшее (на 5,44%) – при $\omega_0 = 100$ рад/нс и оси вращения, направленной вдоль O_z. Это говорит о том, что вращающийся фуллерен благодаря моменту сил гироскопической реакции способен уравнивать внешнее воздействие. При этом крайне важным является подбор оптимальных значений параметров вращательного движения молекул фуллерена: скорости и направления оси вращения, обеспечивающих минимальное значение смещения относительно своего первоначального положения. Данную особенность вращающейся молекулы C₆₀ можно использовать для усиления способности молекулярных кристаллов имеющих вращательные степени свободы его узлов противодействовать динамической деформации вдавливания.

В результате численных экспериментов было исследовано распределение энергии по степеням свободы и описано понятие температуры для узлов молекулярных кристаллов, обладающих большим моментом количества движения. Так было установлено, что распределение энергии по степеням свободы можно условно разделить на 3 категории: колебания центра масс узла, колебания атомов узла в структуре молекулы и вращения узла. Причем, первоначально, при хаотичном движении и взаимодействии со средой, состоящей из набегающих атомов гелия, температура распределяется в соответствии с теоремой Больцмана, однако под действием ускоряющего вращательное движение узлов поля, момент количества движения узлов может возрастать неограниченно, при этом переход в колебания центра масс и колебания атомов узла оказывается незначительным.

В рамках классической молекулярной динамики выполнено исследование вращения фуллеренов в молекулярном комплексе C₂₀@C₈₀. Рассмотрено два случая состояния алмазного комплекса: закреплена внешняя оболочка и случай, когда комплекс является свободным. В случае отсутствия внешних сил и взаимодействий комплекс приобретает инерционный режим вращательного движения вследствие первоначальной нескомпенсированности взаимодействия вершин 20- и 80-гранников (такая нескомпенсированность отсутствовала бы, если бы фуллерены были идеальными сферами) Причем скорость вращения внешней оболочки C₈₀ – 10^{10} рад/сек, а внутренней C₂₀ – в 16 раз больше. Из представленного описания следует, что комплекс C₂₀@C₈₀ можно рассматривать как молекулярный маятник, у которого роль гравитационных сил выполняют силы Ван-дер-Ваальса, действующие между узлами двух кристаллических оболочек. При этом колебательный режим осуществляется со скоростями для C₈₀ - приблизительно 110 м/с, и для C₂₀ – приблизительно 450 м/с. Первоначально C₂₀ совершает угловые колебания вокруг медленно поворачивающейся оси, затем происходит переориентация фуллерена, т.е. существенное изменение в пространстве положения оси колебаний. При этом из-за потенциальности атом-атомного взаимодействия повороты и вибрации в комплексе происходят без диссипации энергии. Получены

также уравнения движения центров масс фуллеренов, определяющие работу комплекса как молекулярного осциллятора. Динамические уравнения для вращательных движений молекул, полученные на основе теоремы о моменте количества движения для относительных движений системы около центров масс фуллеренов. Эти уравнения определяют работу комплекса как молекулярного маятника. Уравнения движения центров масс фуллеренов, определяют вибрации в системе, т.е. работу комплекса как молекулярного осциллятора. Внешнее периодическое электромагнитное поле позволяет придать ориентированные вращения экзоэдральному фуллерену. Таким образом, если комплекс находится внутри материала, являющегося бимолекулярным кристаллом, то такой материал может накапливать значительное количество энергии на внутренних степенях свободы. Это делает материал более инертным к внешним кинетическим воздействиям.

Разработана математическая модель динамики молекулярных кристаллов, образующихся при сближении дископодобных узлов на примере молекул В42. Полученные столбики из молекулярных дисков В42 являются устойчивыми структурами. Определены собственные частоты вращений свободных узлов, которые оказались примерно равными 10^{10} рад/с. В случае отсутствия внешних воздействий обнаружены естественные колебания дисков вокруг положений равновесия со скоростью 10 м/с, порождаемые начальной нескомпенсированностью Ван-дер-ваальсовых и кулоновских сил.

Исследовано взаимодействие газообразной среды со структурой фуллеритоподобных материалов. В частности, исследована динамика фуллеренов молекулярного кристалла, сконструированного на основе (D2d)-C36. Проведенный анализ показал, что, несмотря на колебания углеродных атомов в рассматриваемых молекулах, а также вращения и колебания самих фуллеренов, в кристаллической структуре фуллерита все же существуют туннели для прохождения некоторых свободных частиц. В отношении смеси гелий-метан установлено, что через сверхтонкую кристаллическую пленку фуллерита могут проходить лишь атомы гелия и гелиона. В то же время эта пленка является непроницаемой для метана. Предложена эффективная математическая модель вращательной динамики фуллеренов в материале фуллерита (D2d)-C36.