

Сведения о выполненных работах
в период с 01.07.2021 г. по 30.06.2022 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: д-р физ.-мат. наук Бубенчиков Михаил Алексеевич

За отчетный период этапа исследования, в соответствии с техническим заданием проекта, были выполнены следующие работы.

Была проведена верификация работоспособности созданной в ходе реализации проекта математической и компьютерной модели молекулярной динамики поступательного и вращательного движения узлов молекулярных кристаллов. В ходе анализа литературных данных из открытых источников, материалов описывающих эксперименты по измерению дипольного излучения для интеркалированных ферромагнетиками эндодральных фуллеренов – не обнаружено. Однако найдены обширные данные об общих структурных, механических и электрофизических свойствах интеркалированных железом фуллеренах $\text{Fe}[n]@\text{C}_{60}$ и фуллерите на основе молекул фуллеренов C_{60} . На основе этих данных были верифицированы молекулярно-динамические модели, использованные для проведения расчетов. Также с использованием данных из литературы для случая классического фуллерита на основе C_{60} , разработанная в ходе реализации настоящего проекта математическая модель была экстраполирована на случай $\text{Fe}[n]@\text{C}_{60}(-)$. С учетом того, что влияние внешнего магнитного и электрического поля на фуллерены $\text{Fe}[n]@\text{C}_{60}(-)$ учитывалась в уравнениях движения напрямую как дополнительный член в градиенте правой части, записанной для каждого фуллерена из ансамбля, то такой подход не оставляет сомнения в справедливости полученных результатов. Например, в результате численных экспериментов было установлено, что при появлении внешнего магнитного поля в структурированной по типу фуллерита системе молекул $\text{Fe}[8]@\text{C}_{60}$ появлялся эффект напоминающий широко известный магнетокалорический эффект для сплава Гейслера.

Также, была разработана полная математическая модель молекулярной динамики вращения фуллеренов $\text{Fe}[2-10]@\text{C}_{60}$, $\text{Ni}[2-10]@\text{C}_{60}$, $\text{Co}[2-10]@\text{C}_{60}$ в составе фуллеритоподобной структуры, позволяющая проводить численные расчеты, учитывающие энергию Ван-дер-Ваальса (хорошо описанную потенциалом Леннарда-Джонса), действующую между молекулами $\text{Fe}[2-10]@\text{C}_{60}$, $\text{Ni}[2-10]@\text{C}_{60}$, $\text{Co}[2-10]@\text{C}_{60}$, энергию Кулона и получать полное описание динамики молекул с высокой точностью. Кроме того, в модели были учтены наличия магнитных полей. Для описания вращения был выбран подход углов Эйлера. Полученные уравнения

были интегрированы и решены методом Рунге-Кутты четвертого порядка точности. На основе этой математической модели было построено численное решение, запрограммированное в Fortran90. Таким образом, была исследована элементарная кристаллическая решетка фуллерита, как нейтрального (не имеющего заряда), так и заряженного, в котором узлы имели заряд, локализуемый на интеркалированных агломерациях ферромагнетика в эндодральных фуллеренах $\text{Fe}[2-10]@C_{60}$, $\text{Ni}[2-10]@C_{60}$, $\text{Co}[2-10]@C_{60}$. В результате расчетов были получены теоретические данные о вращении фуллеренов в фуллерите, согласующиеся с экспериментальными, а также новые данные о скоростях колебаний центров масс, воздействию магнитного поля на заряженные фуллерены. Кроме того, были исследованы фуллерены начиная от C_{20} и заканчивая C_{720} и большое число их изомеров. Исследования показали, что наиболее устойчивыми структурами с точки зрения их динамического состояния являются наиболее симметричные молекулы, самыми сферическими являются фуллерены, обладающие I_h -симметрией. Была построена математическая и компьютерная модель процесса их дипольного излучения при нагреве в присутствии стационарного магнитного поля. С помощью математической и компьютерной модели молекулярной динамики фуллеренов в узлах молекулярного кристалла были найдены микроскопические характеристики системы: законы вращательных и колебательных движений узлов решетки (фуллеренов), траектории, описываемые вершинами диполей (связанных зарядов на боковой поверхности фуллеренов) и пр.

Было рассмотрено также движение крупных молекул углерода, представляющих из себя наноторы. Эти объекты находятся в колончатой фазе жидкого кристалла. Выделен минимальный фрагмент жидкокристаллической фазы. Проанализировано динамическое состояние типичной молекулы рассматриваемой структуры. Исследованы структуры из углеродных наноторов, которые также проявляют свойства жидких кристаллов/жидких линий. Для эффективных расчётов было разработано два новых потенциала – потенциал тор-атомных взаимодействий и потенциал тор-торовых взаимодействий. Разработка этих потенциалов была вдохновлена потенциалом Гирифалко, работающим аналогично с нашим тор-торовым потенциалом, только относительно сферических молекул.

Был исследован эффект Джанибекова (теорема промежуточной оси). Исходя из результатов проведенных исследований можно сделать выводы о том, что молекулы также подвержены этому эффекту и в некоторых ситуациях важно учитывать это.

Исследованы гироскопические явления, возникающие в узлах молекулярных кристаллов, имеющих все 3 вращательные степени свободы. Результаты расчетов показали, что при взаимодействии частицы с вращающимся фуллереном наблюдается прецессионное движение. Было обнаружено, что начальная скорость вращения C_{60} оказывает неоднозначное влияние на отклонение фуллерена от его исходного положения. Масса частицы, воздействующей на молекулу фуллерена, сильно влияет на ее прецессионные характеристики. Также, впервые исследовались

гироскопические явления при взаимодействии вращающейся молекулы фуллерена при условии ее нахождения в элементарной кристаллической решетке. Для выявления гироскопических эффектов вращающейся молекулы фуллерена внутри фуллерита был применен метод молекулярной баллистики для падающего на вращающийся фуллерен атома углерода или ксенона, заключенный в кейдж из 12 фуллереновых молекул окружения, по расположению соответствующего молекулярному кристаллу фуллерита. Получено, что вращающийся фуллерен благодаря силе гироскопической реакции способен в некотором смысле уравновесить внешнее воздействие. Эта особенность вращающейся молекулы C₆₀ может быть использована для повышения способности фуллеренсодержащих материалов противодействовать динамической деформации вдавливания. Анализировалось влияние деформации кристалла фуллерита с гранцентрированной кубической решеткой на динамические свойства вращающейся молекулы C₆₀, находящейся в центре выбранного фрагмента, состоящего из 63 молекул фуллерена. В результате проведенных численных экспериментов изучено влияние частоты вращения молекулы фуллерена и направления деформации фрагмента фуллерита на гиродинамическую способность молекулы C₆₀ противостоять внешним силам. Результаты расчетов демонстрируют сильную зависимость смещения вращающейся молекулы от направления угловой скорости фуллерена и характера деформации фрагмента кристалла фуллерита. Наименьшее смещение фуллерена от начального положения наблюдается при нулевой начальной угловой скорости (на 9–17 %) и когда вектор угловой скорости не совпадает с направлением деформации.

Был проведен эксперимент по регистрации надтеплого уровня излучения кристалла фуллерита размерами 5x5 мм. Кристалл с подложкой помещали вблизи полюса электромагнита. Подложку с образцом фуллерита нагревали в среде аргона. Приемником излучения служил оптико-акустический преобразователь 6 (приемник Голея), снабженный фокусирующей линзой 7 из полиэтилена. Излучение фильтровалось слоистой структурой из фторопластовых пленок, разделенных воздушными зазорами. Преимущественная полоса пропускания фильтрующей структуры определялась толщинами пленки и воздушных зазоров, составляющих для максимума пропускания половину длины волны. Для сравнения на тот же самый нагреватель помещали графитовую пластину. Было показано, что исследуемая структура позволяет генерировать терагерцовое излучение, отличающееся от обычного теплового излучения резонансным спектром. Кроме того, установлено, что в соответствии с принципом вращения ориентированных диполей в магнитном поле, излучение обладает круговой поляризацией.