

Сведения о выполненных работах
в период с 01.07.2022 г. по 30.06.2023 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

В ходе выполнения настоящего этапа исследований была построена математическая компьютерная модель молекулярной динамики поступательного и вращательного движения углеродного нанотора, модель двух взаимодействующих углеродных наноторов посредством сил межмолекулярного взаимодействия, а также исследованы модельные случаи взаимодействия заряженных и имеющих магнитный момент углеродных наноторов на примере эндодральных наноторов, интеркалированных агломерациями атомов ферромагнетика и содержащих связанный заряд на внутренней поверхности посредством наличия иона. С помощью конечно-разностных алгоритмов ее численной реализации было построена компьютерная модель молекулярной динамики взаимодействующих углеродных наноторов, на базе которой были проведены численные эксперименты, позволившие найти режимы взаимодействия наноторов, их пространственную конфигурацию псевдокристаллических и псевдожидкокристаллических структур, а также исследовать вопрос взаимодействия наноторов с атомами и молекулами окружающей газообразной среды, при молекулярно-кинетическом взаимодействии. При этом, были найдены характерные времена релаксации системы углеродный нанотор-окружающий ансамбль молекул при различных термодинамических параметрах, обнаружены флотационные режимы динамики этой системы. Для решения этих задач были численно проинтегрированы уравнения движения наноторов как классических частиц, с учетом того, что длина их дебройлевской волны при характерных температурах была много меньше линейных размеров самих частиц.

С помощью построенной компьютерной модели эволюции во времени системы взаимодействующих наноторов было исследовано распределение поля сил межмолекулярного взаимодействия, что позволило определить местоположения локальных минимумов энергии в пространстве, позволяющие найти конфигурацию и параметры возможных кристаллических решеток молекулярных кристаллов, построенных на базе углеродных наноторов различных размеров. Также были исследованы кулоновские и магнитные взаимодействия углеродных наноторов имеющих электрический заряд или магнитный момент с целью изучения вопроса об увеличении энергии когезии молекулярного кристалла. Была исследована прецессия углеродного нанотора при воздействии набегающего не него пробного атома ксенона, в результате чего был обнаружен гироскопический эффект у раскрученного нанотора, находящегося подобно карданову подвесу в минимуме потенциала сил

межмолекулярного взаимодействия окружающих его углеродных наноторов, зафиксированных в пространстве. Была исследована температура перехода вращательного движения в температуру колебания атомов углеродного нанотора, определен предел его термической диссоциации, а также был исследован режим вращения сильно раскрученного углеродного нанотора, для определения предела его центробежной диссоциации. В результате исследования системы взаимодействующих раскрученных углеродных наноторов на основе компьютерной модели был обнаружен коллективный гироскопического эффект. Была определена мера воздействия прецессии одного молекулярного гироскопа на другой, а также было проведено исследование взаимодействия двух раскрученных наноторов, имеющих электрический заряд или магнитный момент, под действием электромагнитных внешних сил.

Также была исследована задача о тормозном излучении вращающегося диполя, представляющего собой углеродный нанотор, имеющий модельный связанный заряд на поверхности. Таким образом, была исследована диссипация кинетической энергии вращательного движения нанотора, имеющего электрический и магнитный момент, на дипольное излучение и излучение Вавилова-Черенкова. Была исследована теоретическая задача о молекулярной динамике углеродного нанотора с учетом релятивистских эффектов, раскрученного до сверхвысоких скоростей, имеющих место после предела центробежной диссоциации молекулы в модельном случае.