

Сведения о выполненных работах
в период с 01.07.2020 г. по 30.06.2021 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

Основная задача промежуточного этапа исследований в 2020-2021 году являлось нахождения устойчивых форм узлов молекулярного кристалла, удовлетворяющих двум основным критериям: наличию значимого дипольного и магнитного момента. Предполагалось использовать магнитный момент для макродиамагнитной ориентации узлов в пространстве под действие стационарного магнитного поля, а дипольный момент – как порождающий электромагнитное излучение. В качестве базового элемента такого кристалла для этого исследовались фуллерены ряда C₂₄–C₈₄, их анионы и катионы, а также эндоэдральные и экзоэдральные системы с модельными интеркалатами Li⁺ и F⁻ как предельные случаи интеркалатов, предающих фуллерену дипольные моменты при внедрении в фуллереновый кейдж. Также в этом ключе исследовались дискообразные молекулы B₄₂ и тороидальные нанотрубки ряда C₂₀₀-C₅₀₀.

В ходе реализации настоящего этапа исследований были достигнуты следующие результаты.

Были исследованы энергетические состояния ионов фуллерена C₆₀⁻, C₆₀⁺. Было обнаружено, что избыточный заряд не локализуется на поверхности молекулы, а заселяет молекулярную орбиталь. В отсутствие внешнего электрического поля молекулярная орбиталь симметрична в пи и сигма структуре, а дипольный момент молекулы остается равен нулю. Эти результаты согласуются с литературными данными и позволяют заключить о невозможности использовании простого иона не модифицированного фуллерена для построения молекулярного кристалла, каждый узел которого обладает существенным дипольным моментом.

Была исследована возможность образования молекулярных кристаллов из экзоэдральных фуллеренов R@C₆₀ с различными присоединенными атомами и молекулярными группами в модельных случаях с использованием методов потенциалов межмолекулярного взаимодействия (IREBO) и авторского метода молекулярной статики. Планировалось с помощью присоединенных групп (образующих молекулярно-ионный комплекс или просто имеющих дипольный момент) получить фуллерид, обладающий значительным дипольным моментом, особенно учитывая большое количество литературных данных, свидетельствующих

об успешных попытках синтезировать подобного рода фуллериды на практике. Однако, в результате исследований было установлено, что отклонения от симметрии внешней поверхности сферы экзоэдрального фуллерена делают структуру образованного из них молекулярного кристалла не стабильной, скорее напоминающий жидкокристаллическую. Более того, с увеличением приведенной температуры вращения узлов стабильность нелинейно падала, и структура неизбежно приходила к коллапсу.

Были изучены варианты образования эндоэдрального фуллерена как с помощью ионов металлов, так с помощью интеркаляции атомов или даже агломераций, имеющих дипольный момент. Расчеты и литературный обзор показали, что интеркаляция атомов или атомных агломераций является оптимальным методом образования узла, обладающего дипольным моментом. Эндоэдральные фуллерены могут иметь как обобщенную молекулярную орбиталь, так и локализованную электронную плотность при интеркаляции иона. При интеркаляции атома возможно его свободное перемещение внутри фуллеренового кейджа, или также возможно образование связи на внутренней поверхности. На основе обнаруженных литературных данных о получении эндоэдральных фуллеренов (Fe, Ni, Co)@C₆₀ особенно перспективными являются данные о внедрении агломераций железа Fe[n]@C₆₀, причем такие фуллериды относительно не сложно получить на практике и они могут обладать значительным дипольным (в случае недостатка или избытка электронов у группы (Fe₂ – Fe₇) и магнитном (до 6 μ) моментом одновременно.

Была построена смешанная дискретно-континуальная модель и создано программное обеспечение для анализа динамических свойств вращающейся молекулы фуллерена в кристалле фуллерита. Впервые выявлены условия, при которых возникает сильный гироскопический эффект, позволяющий существенно увеличить способность фуллеренсодержащих материалов (до 15 раз) противодействовать динамической деформации вдавливания. При исследовании взаимодействия набегающей заряженной частицы с заряженным фуллереном, совершающим вращательно-колебательные движения в кристалле фуллерита, обнаружено значительное влияние наличия заряда на снижение ионизированного внешнего воздействия на фуллерен (в 20-25 раз). Показано, что наличие заряда у фуллерена также позволяет уменьшить влияние внешнего воздействия на его вращательное движение.

Были изучены различные варианты построения молекулярных кристаллов из фуллеренов ряда C₂₄–C₈₀. Для описания вращательной динамики крупных углеродных молекул в молекулярных кристаллах применен подход Эйлера, используемый в классической механике для описания вращений любых тел около их центров масс. Рассмотрены фуллериты, имеющие ПК и ГЦК решетки, и фуллерены, составляющие эти материалы, из ряда C₂₄–C₈₀. Рассчитана средняя энергия взаимодействия пар различных изомеров фуллеренов в зависимости от расстояния

между их центрами. На основе этих данных конструируются фуллериты и определяется характер и интенсивность угловых перемещений фуллеренов в этих кристаллах.

Были изучены торообразные базисные элементы, в целях конструирования молекулярного кристалла, способного породить дипольное излучение. Были проведены исследования конструкции и динамики вращательного движения тороидальных нанотрубок C200-C500 обладающих магнитными и дипольными моментами, а также композиций из них – молекулярных кристаллов подобных фуллериту, со внутренними вращательными степенями свободы (торритов). В результате исследований на основе компьютерного моделирования не удалось найти стабильных форм торритов, обладающих свойствами, присущими твердому телу. Обнаруженные (теоретически, с использованием методов прямого численного и компьютерного моделирования) формы молекулярных кристаллов торрита - имели гексогональные сингонии и более соответствовали жидкокристаллическим системам. Были изучены дискообразные базисные элементы, в целях конструирования молекулярного кристалла, способного породить дипольное излучение. Целью этой работы было теоретическое исследование дискообразных структур, на модельном примере систем молекул B42. Исследование заключалось в расчете самоорганизации молекулярно-кристаллической структуры молекул B42, скоростей колебаний и вращений дисковых молекул, в определении их поступательных перемещений, а также в анализе стабильности исследуемых структур. Разработанная математическая модель опиралась на уравнения классической молекулярной динамики с учетом оценки деброилевской волны, приводящей к не квантовому случаю.

На основании полученных результатов, а также обзора современного состояния исследований, для реализации заключительной стадии проекта было выбрано направление конструирования молекулярных кристаллов, формируемых из эндоэдральных фуллеренов, интеркалированных атомными кластерами Fe, Ni, Co.