МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
БУРЯТСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
ИМЕНИ ДОРЖИ БАНЗАРОВА
НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ
ТОМСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ

ГЕОМЕТРИЯ МНОГООБРАЗИЙ И ЕЕ ПРИЛОЖЕНИЯ

Материалы Шестой научной конференции с международным участием

(Улан-Удэ — оз. Байкал, 27–29 августа 2020 г.)

Улан-Удэ
Издательство Бурятского госуниверситета
2020

УДК 514.75-77, 51.72-74, 372.851
ББК 22, 74
Г 361

Авторы опубликованных материалов несут ответственность за точность приведенных результатов и прочих сведений

Г 361 **Геометрия многообразий и её приложения:** материалы Шестой научной конференции с международным участием (Улан-Удэ — оз. Байкал, 27–29 августа 2020 г.) / отв. ред. В. Б. Цыренова. — Улан-Удэ: Изд-во Бурятского госуниверситета, 2020. — 340 с. ISBN 978-5-9793-1507-2

В сборник включены тезисы и статьи участников шестой научной конференции с международным участием «Геометрия многообразий и её приложения». Работа представлена в следующих направлениях: геометрия дифференцируемых многообразий, математическое и компьютерное моделирование прикладных задач механики и информационных систем, состояние и перспективы математического образования и вопросы преподавания математики.

Geometry of manifolds and its applications: the sixth scientific conference with international participation (Ulan-Ude – Lake Baikal, August 27 — August 29, 2020) / resp. ed. V. B. Tsyrenova. — Ulan-Ude: Buryat State University Publishing Department, 2020. — 340 p.
ISBN 978-5-9793-1507-2

The book includes the participants` abstracts and articles of the sixth scientific conference with international participation «Geometry of manifolds and its applications». There are following fields such as: geometry of differentiable manifolds, mathematical and computer modeling of applied problems of mechanics and information systems, the condition and perspectives of the mathematical education and questions of teaching mathematics.

ISBN 978-5-9793-1507-2

УДК 531.133.1, 531.16, 51-73

© А. М. Бубенчиков, А. С. Челнокова

ДИНАМИКА ФУЛЛЕРЕНОВ МОЛЕКУЛЯРНОГО КРИСТАЛЛА НА ОСНОВЕ (D2d)-C_{36}[5]

Аннотация. В работе представлена математическая модель динамики фуллеренов молекулярного кристалла, сконструированного на основе (D2d)-C_{36}. В рамках этой модели с использованием подхода Эйлера построены уравнения вращательной динамики молекул C_{36}. Проведенный анализ показал регулярный характер вращения и колебания фуллеренов в кристаллической структуре фуллерита. Расчетами установлено, что средняя частота вращения составляет около 13 ГГц. За счет выбора начального угла нутации была гарантирована надежность выполняемых расчетов, т.к. кинематические соотношения Эйлера в данном случае не достигают своих точек особенностей.

Ключевые слова: изомер (D2d)-C_{36}, кристалл с простой кубической решеткой, фуллерит, вращательная динамика.

© A. Bubenchikov, A. Chelnokova

DYNAMICS OF FULLERENES OF A MOLECULAR CRYSTAL BASED ON (D2d) -C_{36}

Abstract. The article presents the mathematical model of dynamics of fullerite molecular crystal constructed on the basis of (D2d) -C_{36}. Within the framework of this model, using the Euler approach, the equations of rotational dynamics of C_{36} molecules are constructed. Analysis showed a regular rotation and vibrations of fullerenes in a crystalline structure of fullerite. Calculations found that the average rotation frequency is about 13 GHz. By choosing the initial angle of nutation, the reliability of the calculations was guaranteed, because Euler's kinematic relations in this case do not reach their singularities.

Keywords: the (D2d)-C36 isomer, crystals with a simple cubic lattice, fullerite, rotational dynamics.

Введение. Существует несколько изомеров молекул C_{36}, в том числе высокосимметричный кластер D6h. Этот изомер обладает повышенной способностью к образованию полимерных структур

[5] Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 19-31-90087

[1]. Существует также несколько типов димеров этого изомера [2-5], каждый из которых представляет большой интерес с точки зрения формирования новых форм углерода. Приведенные в [6] расчеты показывают, что вновь синтезированная молекула (D6h)-C_{36} образует кристалл Ван-дер-Ваальса ромбоэдрической или гексагональной структуры. Показано также, что если молекулы расположены близко друг к другу, то они имеют тенденцию образовывать дополнительные связи. Группа китайских ученых под руководством J. Gao [7,8] рассмотрела изомеры C_{36} и критерии свободной энергии для роста кластеров. Они показали, что изомеры с низкой энергией играют важную роль в динамике кластеров C_{36}. При этом самой низкой свободной энергией обладает изомер с симметрией D2d.

Такой фуллерен является более устойчивым, поэтому может образовывать классическую форму молекулярного кристалла с простой кубической решеткой.

1. Математическая модель. Взаимодействие фуллеренов в кристалле фуллерита будем рассматривать на основе перекрестных атом-атомных взаимодействий. Несмотря на то, что силовые центры в рассматриваемом фуллерене взаимодействуют с силовыми центрами другого фуллерена не так как свободные атомы углерода, в потенциале парных взаимодействий атомов его параметры могут быть найдены подходящим образом. На рисунке 1 показана статическая модель изомера (D2d)-C_{36}, где силовые центры представлены сферами. В моделях классической механики необходимо знать координаты этих центров вне зависимости от того учитывается тепловое движение атомов или нет.

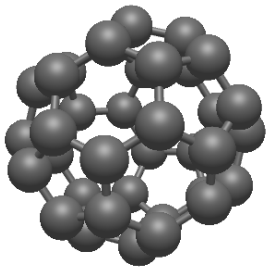


Рис. 1. Изомер (D2d) C_{36}

Фуллерены в молекулярном кристалле удерживаются силами Ван-дер-Ваальса и имеют возможность вращаться вокруг собственных центров масс. Естественно, что фуллерены участвуют и в поступательных перемещениях около их средних положений в молекулярном кристалле. Атомы углерода, составляющие фуллерен, участвуют также в тепловых перемещениях.

Для всех указанных перемещений молекул и атомов могут быть выписаны классические уравнения динамики. Уравнения вращательной динамики фуллеренов могут быть построены в рамках подхода Эйлера, обобщенного на случай деформации фуллеренов в результате тепловых перемещений атомов их составляющих. Записанные в скалярном виде, такие уравнения выражают проекции векторной теоремы о моменте количества движения на подвижные оси, связанные с вращающимся фуллереном.

$$\frac{dK_\xi}{dt} + qK_\zeta - rK_\eta = L_\xi, \tag{1}$$

$$\frac{dK_\eta}{dt} + rK_\xi - pK_\zeta = L_\eta, \tag{2}$$

$$\frac{dK_\zeta}{dt} + pK_\eta - qK_\xi = L_\zeta. \tag{3}$$

Здесь L_ξ, L_η, L_ζ - компоненты вектора момента сил всех атом-атомных взаимодействий; K_ξ, K_η, K_ζ - компоненты кинетического момента; p,q,r – компоненты вектора угловой скорости фуллерена. Все вектора, используемые в записи (1)−(3), представлены в подвижном базисе, связанном с вращающимся фуллереном.

Компоненты кинетического момента связаны с компонентами вектора мгновенной угловой скорости следующими соотношениями:

$$K_\xi = A'p - Fq - Er, \tag{4}$$

$$K_\eta = -Fp + B'q - Dr, \tag{5}$$

$$K_\zeta = -Ep - Dq + C'r. \tag{6}$$

Здесь A', B', C', D, E, F - компоненты тензора инерции, которые находятся по формулам:

$$A' = m\sum_{i=1}^{S_1}\left(\eta_i^2 + \zeta_i^2\right), \quad D = m\sum_{i=1}^{S_1}\eta_i\zeta_i, \tag{7}$$

$$B' = m\sum_{i=1}^{S_1}\left(\xi_i^2 + \zeta_i^2\right), \quad E = m\sum_{i=1}^{S_1}\xi_i\zeta_i, \tag{8}$$

$$C' = m\sum_{i=1}^{S_1}\left(\xi_i^2 + \eta_i^2\right), \quad F = m\sum_{i=1}^{S_1}\xi_i\eta_i. \tag{9}$$

где m – масса атома углерода, S – количество таких атомов в фуллерене (в данном случае 36).

С учетом (4)–(6) уравнения (1)–(3) можно рассматривать как систему обыкновенных дифференциальных уравнений первого порядка относительно p,q,r. Для ее замыкания необходимо использовать кинематические соотношения Эйлера:

$$p = \dot{\psi}\sin\theta\sin\varphi + \dot{\theta}\cos\varphi, \tag{10}$$

$$q = \dot{\psi}\sin\theta\cos\varphi - \dot{\theta}\sin\varphi, \tag{11}$$

$$r = \dot{\psi}\cos\theta + \dot{\varphi}. \tag{12}$$

Здесь φ,ψ,θ – углы Эйлера, точка над знаком функции означает дифференцирование по времени.

Уравнения вращательного движения (1)−(3) представлены в подвижном базисе. Однако при подсчете моментов силовых воздействий на фуллерен необходимо знать расстояния между силовыми центрами. Эти расстояния могут быть определены лишь в абсолютном базисе. Переход от одного базиса к другому осуществляется с помощью прямой и обратной матрицы поворота.

Все выписанные дифференциальные уравнения математической модели оказались дифференциальными уравнениями первого порядка. Для их численного решения удобной и эффективной является схема Рунге-Кутты четвертого порядка точности. Все представленные результаты получены интегрированием с постоянным шагом по времени $\Delta t = 10^{-6}$ нс.

2. Результаты расчетов. С позиций поля потенциальных взаимодействий фуллерены C_{36} в кристалле фуллерита, без учета коллективных эффектов, находятся в потенциальных ямах друг друга. Положение потенциальной ямы можно найти, сближая два фуллерена предварительно разнесенных на достаточное расстояние. При этом из-за отсутствия сферической симметрии во взаимодействии необходимо будет усреднять результат по углам поворота фуллеренов относительно их центров масс. В настоящей работе мы сближали два вращающихся фуллерена, при этом частота вращения была примерно равна частоте угловых колебаний узлов в молекулярном кристалле фуллерита. На рисунке 2 показан

результат такого расчета. Минимум потенциальной энергии, равный $-1{,}46 \cdot 10^{-4}$ эВ, достигается при r = 0.8113 нм, что имеет хорошее согласование с результатами, полученными с использованием других потенциалов [9].

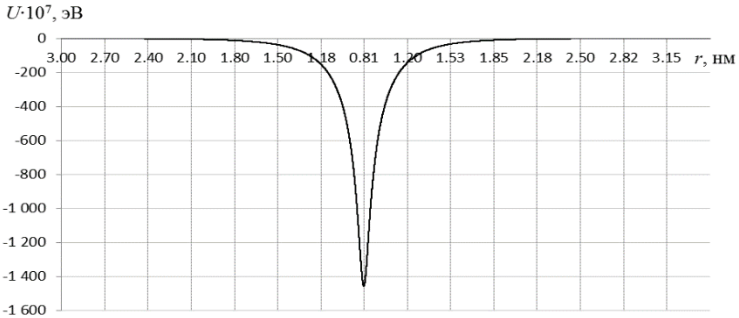


Рис. 2. *LJ*-потенциал взаимодействия 2 фуллеренов C_{36} в зависимости от расстояния между их центрами масс.

Когда найдена дистанция, минимизирующая энергию взаимодействия двух фуллеренов, узлы молекулярного кристалла можно скомпоновать в представительный фрагмент, который должен обеспечивать характерное вращение центральному фуллерену (рисунок 3).

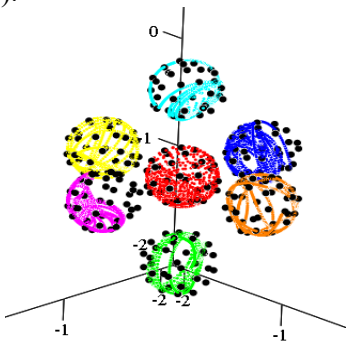


Рис. 3. Симметричный фрагмент.
Сплошными линиями показаны траектории выбранных атомов углерода на каждом из фуллеренов, черные точки – начальное положение всех атомов углерода в рассматриваемой ячейке из 7 фуллеренов C_{36}(D2d).

Используя этот фрагмент, была рассчитана угловая скорость изначально покоящегося фуллерена. На рисунке 4 приведено распределение величины угловой скорости внутреннего узла ПК-решетки фуллерита. Участок $t \in [0, 0.02]$ нс можно назвать участком, на котором завершается стабилизация вращений фуллеренов.

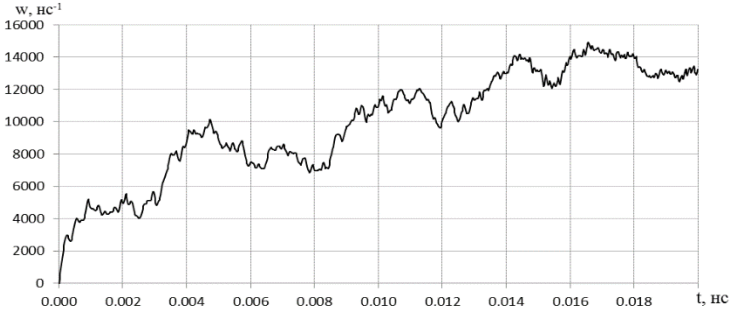
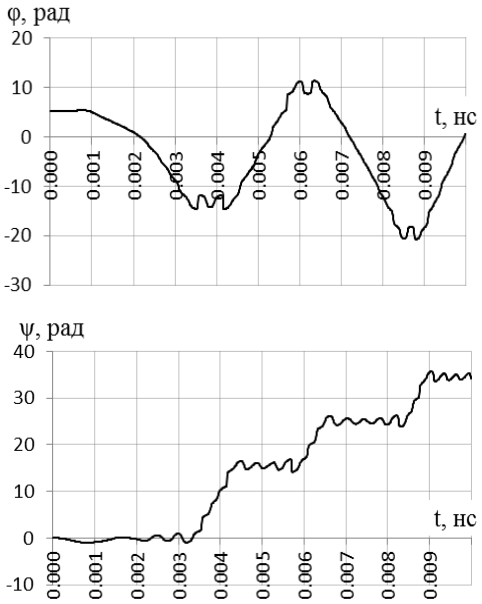


Рис. 4. Модуль вектора угловой скорости центрального фуллерена в рассматриваемой ячейке из 7 фуллеренов C_{36}(D2d)

Вращения фуллеренов удобно характеризовать зависимостями углов Эйлера от времени. Эти зависимости показаны на рисунке 5.



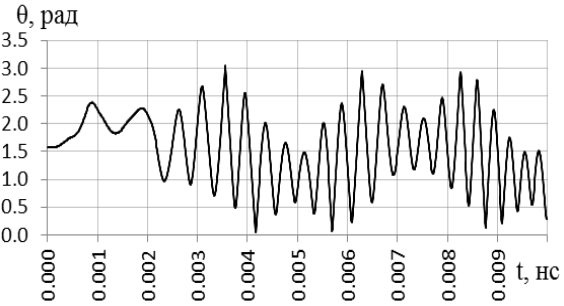


Рис. 5. Значения углов Эйлера центрального фуллерена в рассматриваемой ячейке

Первый график на рисунке 5 показывает, что в одном из угловых направлений фуллерен C_{36} делает два полных оборота, а далее два колебания небольшой угловой амплитуды. После чего изменяет направление вращения. Угол прецессии ψ имеет ступенчатый рост. Причем на ступеньках наблюдаются малые угловые колебания. В целом прецессия характеризуется однонаправленным изменением угловой координаты. Угол нутации θ характеризуется колебаниями, изменяющимися от 0.5 до 1 рад. Эти колебания происходят около своего начального значения $\pi/2$. Таким образом, в проведенных расчетах угол нутации всегда находится в границах от 0 до π. Все это гарантирует надежность полученных расчетных данных.

Заключение. Предложена эффективная математическая модель вращательной динамики фуллеренов в материале фуллерита. Описана схема получения численного решения. Расчеты показали, что в кристалле фуллерита молекулы C_{36} вращаются регулярным образом. Найденный характер вращения фуллеренов позволил за счет начального разворота молекулы C_{36} относительно подвижного базиса добиться того, что во все последующее время угол нутации будет находиться в диапазоне от 0 до π и не пересекать границ этого интервала. Это делает расчет надежным, поскольку известно, что кинематические соотношения Эйлера, разрешенные относительно производных по времени от углов Эйлера, имеют особенность в точках $\theta = 0, \pm\pi, \pm 2\pi, \ldots$.

Литература

1. Gal'pern E. G., Stankevich I. V., Chernozatonski L. A., Chistyakov A. L. Structure and electronic structure of b-Cm barrelenes, m = 36 + 12n // Pis'ma Zh. Éksp. Teor. Fiz. 1992. Vol. 55. P. 469−472.
2. Grossman J. C., Cote M., Louie S., Cohen M. L. Electronic and structural properties of molecular C_{36} // Chem. Phys. Lett. 1998. Vol. 284. P. 344−349.
3. Collins P. G., Grossman J. C., Cote M. et al. Scanning tunneling spectroscopy of C_{36} // Phys. Rev. Lett. 1999. Vol. 82. P. 165−168.
4. Menon M., Richter E. Structure and stability of solid C_{36} // Phys. Rev. B. 1999. Vol. 60. P. 13322−13324.
5. Fowler P. W., Heine T., Rogers K. M. et al. C_{36}, a hexavalent building block for fullerene compounds and solids // Chem. Phys. Lett. 1999. Vol. 300. P. 369−378.
6. Burgos E., Halac E., Bonadeo H. On the crystal structure of C_{36} // Chem. Phys. Lett. 2000. Vol. 320. P. 14–18.
7. Gao J., Lin Z.-Z., Ning X.-J., Isomers of C_{36} and free energy criteria for cluster growth // J. Chem. Phys. 2007. Vol. 126. 174309.
8. Gao J., Meng Y., Ni J. Isomer spectrum and evolution spectrum of C_{36} isomers in buffer gas // Adv. Mater. Res. 2013. Vol. 711. P. 56−61.
9. Zubov V. I., Zubov I. V., Rabelo J. N. T. Theoretical study of thermodynamic properties of a family of fullerites from C_{36} to C_{96} in the equilibrium with their vapors // J. Phys. Chem. B. 2003. Vol. 107. P. 10458-10463.

Бубенчиков Алексей Михайлович, д.ф.-м.н., профессор, ведущий научный сотрудник регионального научно-образовательного математического центра Томского государственного университета, 634050, Томск, пр. Ленина, 36. E-mail: bubenchikov_am@mail.ru

Челнокова Анна Сергеевна, аспирант, ассистент кафедры теоретической механики, младший научный сотрудник регионального научно-образовательного математического центра Томского государственного университета, 634050, Томск, пр. Ленина, 36. E-mail: smolina-nyuta@mail.ru

Bubenchikov Alexey Mikhailovich, Doctor of Physics and Mathematics, Professor, Leading Researcher, TSU

Chelnokova Anna Sergeevna, Graduate Student, Assistant, Junior Researcher, TSU

СОДЕРЖАНИЕ

ГЕОМЕТРИЯ ДИФФЕРЕНЦИРУЕМЫХ МНОГООБРАЗИЙ

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ И КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРИКЛАДНЫХ ЗАДАЧ МЕХАНИКИ