МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ

ПЕРСПЕКТИВЫ РАЗВИТИЯ ФУНДАМЕНТАЛЬНЫХ НАУК

Том 1. Физика

Сборник научных трудов
XX Международной конференции студентов, аспирантов
и молодых ученых

25–28 апреля 2023 г.

PROSPECTS OF FUNDAMENTAL SCIENCES DEVELOPMENT

Volume 1. Physics

Abstracts
XX International Conference of students, graduate students
and young scientists

April 25–28, 2023

ТОМСКИЙ ПОЛИТЕХНИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ

Национальный исследовательский Томский государственный университет

ТГАСУ

ТУСУР TUSUR UNIVERSITY
Томский государственный университет систем управления и радиоэлектроники

ТОМСКИЙ НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ МЕДИЦИНСКИЙ ЦЕНТР РОССИЙСКОЙ АКАДЕМИИ НАУК

Томск 2023

УДК 501:004(063)
ББК 72:32.81л0
П27

Перспективы развития фундаментальных наук : сборник трудов XX Международной конференции студентов, аспирантов и молодых ученых (Томск, 25–28 апреля 2023 г.) : в 7 томах. Том 1. Физика / под ред. И.А. Курзиной, Г.А. Вороновой. – Томск : Изд-во Томского политехнического университета, 2023. – 442 с.

П27

ISBN 978-5-4387-1137-7 (т. 1)
ISBN 978-5-4387-1136-0

Сборник содержит труды участников XX Международной конференции студентов, аспирантов и молодых учёных «Перспективы развития фундаментальных наук», представленные на секции «Физика».

Предназначен для студентов, аспирантов, молодых ученых и преподавателей, специализирующихся в области физики конденсированного состояния, физики поверхности, физики ускорителей, водородной энергетики, геофизики, а также моделирования физических процессов.

УДК 501:004(063)
ББК 72:32.81л0

ISBN 978-5-4387-1137-7 (т. 1)
ISBN 978-5-4387-1136-0

УДК 531/534

ИССЛЕДОВАНИЕ ДИНАМИКИ C_{60} В ГАЗЕ

Д.В. Мамонтов, А.С. Челнокова, О.Д. Носырев
Научный руководитель: профессор, д.ф-м.н. А.М. Бубенчиков
Национальный исследовательский Томский государственный университет,
Россия, г. Томск, пр. Ленина, 36, 634050
E-mail: orevaore@mail.ru

STUDY OF C_{60} DYNAMICS IN GAS

D.V. Mamontov, A.S. Chelnokova, O.D. Nosyrev
Scientific Supervisor: Prof., Dr. A.M. Bubenchikov
Tomsk State University, Russia, Tomsk, Lenin str., 36, 634050
E-mail: orevaore@mail.ru

Abstract. *In the present work, we performed calculations of the molecular dynamics of fullerene in a volume filled with nitrogen. The temperatures of the gas component and fullerene were estimated, the ergodicity hypothesis was tested, and the velocity distribution of nitrogen molecules was obtained, corresponding to the theoretical Maxwell distribution.*

Введение. Изобретения в сфере наноуглеродных материалов используются в устройствах для перекачки воды в наноразмерных масштабах, создания систем для локального охлаждения областей того же масштаба и контейнеров для доставки лекарственных веществ, а также многих других приложений [1-7]. Большое значение при разработке новых наноразмерных устройств имеет метод математического моделирования, позволяющий оптимизировать экспериментальный поиск в сфере нанотехнологий [8-13].

В настоящей работе проводились расчеты классической молекулярной динамики. Предметом исследования был газ азота, в который помещен фуллерен C_{60}. Начальные скорости всех молекул соответствовали их средней тепловой при температуре 300 К. Направление вектора скорости при этом было случайным.

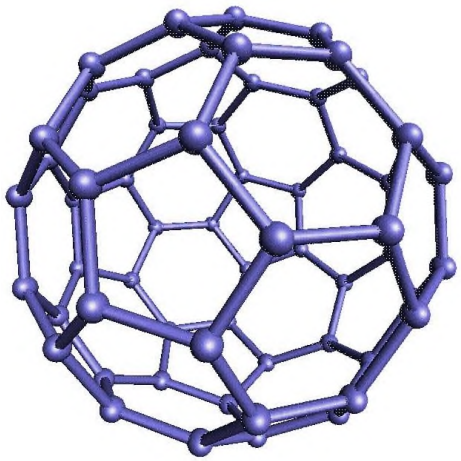

Рис. 1. Схематическое изображение фуллерена C_{60}

Наибольший интерес в данной работе вызывает температура фуллерена. Можно ли определить температуру всего лишь одной молекулы, будет ли поддерживаться между газом и фуллереном термодинамическое равновесие и как распределится энергия фуллерена по степеням свободы.

Цель этой статьи постараться ответить на вышеописанные вопросы.

Экспериментальная часть. Разработанная математическая модель полностью опирается на уравнения классической механики. Скорости центров масс определяются из (1).

$$\sum_{k=1}^{N} m_i \frac{d\mathbf{v}_i}{dt} = gradU, \frac{d\mathbf{r}_i}{dt} = \mathbf{v}_i. \quad (1)$$

Здесь m_i – масса атома, $\mathbf{v}_i$ – его скорость центра масс, U – потенциал взаимодействия, $\mathbf{r}_i$ – радиус-вектор атома. N – число атомов в молекуле. Потенциал взаимодействия – Леннарда-Джонса. Параметры Леннарда-Джонса – табличные. При этом, для молекул азота и для молекулы фуллерена рассчитывается поступательная скорость перемещения, но для фуллерена рассчитываются ещё и вращательные скорости. Угловые скорости находятся из уравнения выражающего теорему об изменении момента количества движения фуллерена для относительного движения около его центра масс. Уравнения интегрируются при помощи метода Рунге-Кутты 4 порядка с постоянным шагом по времени.

Для того чтобы сэкономить время расчета, моделирование проводится в объёме, ограниченном кубом. При приближении к стенкам куба молекулы зеркально отражаются, не меняя энергии системы. Таким образом заданы граничные условия, имитирующие периодичность, при которой молекулы улетают в смежные объемы и прилетают из них.

Результаты. В результате моделирования, примерно через 1 нс скорости молекул азота выстраиваются соответственно с теоретическим распределением Максвелла, аналитический вид которого представлен в (2):

$$f(v) = 4\pi v^2 \left(\frac{m}{2\pi kT}\right)^{3/2} \cdot e^{\left(-\frac{mv^2}{2kT}\right)}. \quad (2)$$

Температуры компонент представлены на рисунке 2.

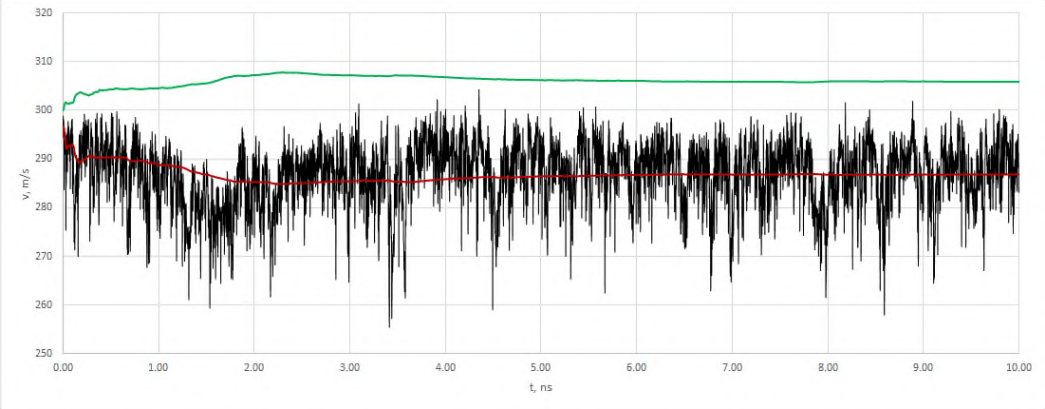

Рис. 2. Температура компонент

Черной линией на рис. 2 показана температура азота мгновенная, а красной линией показано осреднение этой температуры во времени. Видно, что температура газа снизилась со временим. Послужить этому могли две причины. Во-первых, это взаимодействие с фуллереном, и, во-вторых, это может быть некомпенсированная потенциальная энергия. Зеленая линия – осредненное значение

температуры фуллерена. Она является зеркальным отражением температуры азота. При этом наблюдается температурное неравновесие между двумя компонентами. При этом обе температуры устанавливаются на определенном значении. Здесь мы полагаем, что определение температуры осреднением по количеству молекул аналогично осреднение по количеству взаимодействий для одной молекулы. Вращательная энергия фуллерена оказалась такой же, как кинетическая, более того, энергия распределилась равномерно и по всем степеням свободы.

Заключение. В результате проведенных исследований получены данные о динамике и энергии фуллерена в газе. Энергия фуллерена распределилась равномерно по всем степеням свободы. Хотя наблюдается некоторое температурное неравновесие компонент, это можно объяснить тем, что не вся кинетическая энергия больших молекул является температурой.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Farimani, A.B., Wu, Y.B. & Aluru, N.R. Rotational motion of a single water molecule in a buckyball // Phys. Chem. Chem. Phys. – 2013. – Vol. 15. – |P. 17993-18000.
2. Heiranian, M., Farimani, A.B. & Aluru, N.R. Water desalination with a single-layer MoS2 nanopore // Nat. Commun. – 2015. – Vol. 6. – P. 8616-8616.
3. Suk, M.E. & Aluru, N.R. Water Transport through Ultrathin Graphene. // J. Phys. Chem. Lett – 2010. – Vol. 1. – P. 1590-1594.
4. Komatsu, K., Murata, M. & Murata, Y. Encapsulation of molecular hydrogen in fullerene C60 by organic synthesis // Science – 2005. – Vol. 307. – |P. 238–240.
5. Ma, F. et al. Proton transfer in the complex H3N center dot center dot center dot HCl catalyzed by encapsulation into a C-60 cage // ChemPhysChem. – 2009. – Vol. 10. – P. 1112-1116.
6. Kurotobi, K. & Murata, Y.A single molecule of water encapsulated in fullerene C-60 // Science. – 2011. – Vol. 333. – P. 613-616.
7. Xu, B.X. & Chen, X. Electrical-driven transport of endohedral fullerene encapsulating a single water molecule // Phys. Rev. Lett. – 2013. – Vol. 110. – P. 156103.
8. Lun-Fu, A., Borodin, V., Bubenchikov, M., Bubenchikov, A., Mamontov, D. Fullerene in a Magnetic Field. // Crystals – 2022. – Vol. 12. – P. 521.
9. Lun-Fu A.V. et al. Numerical study of rotational dynamics of carbon nanotori during intermolecular interaction. // J. Phys.: Conf. Ser. – 2022. – Vol. 2211. – P. 012004.
10. Bubenchikov M. et al. Studying the possibility of using fullerenes inside carbon nanotubes as a molecular engine. // J. Phys.: Conf. Ser. – 2022. – Vol. 2211. – P. 012005.
11. Lun-Fu et al. Interaction of molecular tori in columnar structures // J. Phys.: Condens. Matter– 2021. – Vol. 34. – P. 125101
12. Bubenchikov A.M. et al. Dynamic state of columnar structures formed on the basis of carbon nanotori // Fullerenes, Nanotubes and Carbon Nanostructures. – 2021. – Vol. 29. – P. 825-831.
13. Bubenchikov A.M. et al. Movement of fullerenes and their dimers inside carbon nanotubes // Fullerenes, Nanotubes and Carbon Nanostructures. – 2021. – Vol. 29. – P. 803-809.