

## Моделирование образования икосаэдрического фуллерена $C_{60}$ за счет миграции и слияния $sp$ -атомов

Полынская Ю.Г.<sup>1</sup>, Кедало Е.М.<sup>1,2</sup>, Синица А.С.<sup>1,3</sup>, Книжник А.А.<sup>1,3</sup>, Попов А.М.<sup>4</sup>

*alexsinitsa91@gmail.com*

<sup>1</sup> ООО "Лаборатория Кинтех", Москва, Россия

<sup>2</sup> Московский Физико-Технический Институт, Москва, Россия

<sup>3</sup> НИЦ Курчатовский Институт, Москва, Россия

<sup>4</sup> Институт спектроскопии РАН, Троицк, Россия

Хотя изомер фуллерена  $C_{60}$  с икосаэдральной симметрией ( $C_{60}$ -Ih) был синтезирован около 40 лет назад, до сих пор однозначно не определен атомистический механизм, объясняющий большой выход именно этого наиболее распространенного фуллерена. В рамках парадигмы самоорганизации хаотической углеродной системы структура начальных оболочек фуллеренов должна содержать дефекты. Поэтому для объяснения механизма отбора изомера  $C_{60}$ -Ih необходимы реакции перестройки связей после образования начальной оболочки. Были предложены такие реакции как вставка и испускание молекулы  $C_2$ , трансформация Стоуна-Уэльса (см. обзор [1]).

Ранее нашей группой был предложен новый атомистический механизм отбора распространенных изомеров фуллеренов, включающий: 1) присоединение одиночных атомов углерода с образованием  $sp$ -дефекта, 2) миграция  $sp$ -дефекта к  $sp^2$ -структурным дефектам, 3) отжиг  $sp^2$ -дефектов с помощью автокатализа  $sp$ -атомом и 4) последующая встреча  $sp^2$ -дефектов и аннигиляция пар  $sp$ -дефектов с образованием  $sp^2$ -структуры [2,3]. В данной работе исследован процесс образования  $C_{60}$ -Ih из фуллерена  $C_{58}$  в рамках данного механизма. Для этого реализован новый подход, в котором эволюция топологии структуры фуллерена описывается на основе теории графов, что позволяет на порядки величины уменьшить компьютерное время моделирования процесса эволюции структуры по сравнению с атомистическим подходом. Вероятности реакций перестройки связей, соответствующих изменению топологии структуры, определяются заранее на основе теории функционала плотности. С помощью данной модели рассчитана доля изомера  $C_{60}$ -Ih среди других изомеров  $C_{60}$  как функция температуры и оценены характерные времена трансформации  $C_{58}$  в  $C_{60}$ -Ih. Обсуждаются преимущества предложенного механизма отбора по сравнению с другими моделями.

Исследование поддержано грантом Российского научного фонда № 22-73-00023, <https://rscf.ru/project/22-73-00023/>.



### Ссылки

- 1) Popov A. M. et al. // Fuller. Nanotub. Carbon Nanostructures – 2021. – Т. 29. – №. 10. – С. 755-766.
- 2) Sinitsa A. S. et al. // J. Phys. Chem. C. – 2017. – Т. 121. – №. 24. – С. 13396-13404.
- 3) Sinitsa A. S. et al. // J. Phys. Chem. C. – 2020. – Т. 124. – №. 21. – С. 11652-11661.