

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

Полынская Ю.Г.¹, Кедало Е.М.^{1,2}, Синица А.С.^{1,3}, Книжник А.А.^{1,3}, Попов А.М.⁴

alexsinitsa91@gmail.com

¹ ООО "Лаборатория Кинтех", Москва, Россия

² Московский Физико-Технический Институт, Москва, Россия

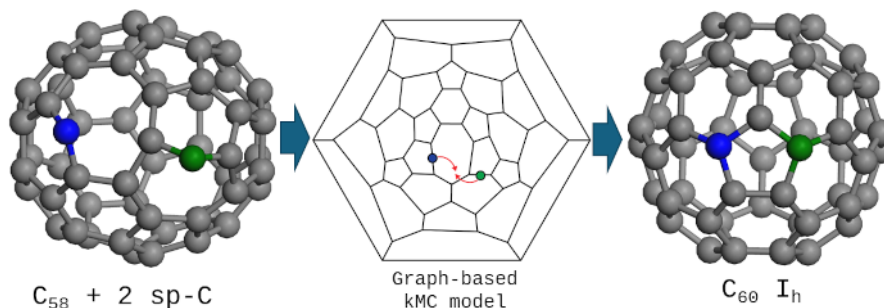
³ НИЦ Курчатовский Институт, Москва, Россия

⁴ Институт спектроскопии РАН, Троицк, Россия

Хотя изомер фуллерена C_{60} с икосаэдральной симметрией (C_{60} -I_h) 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} -I_h 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} -I_h 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} -I_h среди других изомеров C_{60} как функция температуры и оценены характерные времена трансформации C_{58} в C_{60} -I_h. 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.