

Энергетика и кинетика миграции sp-атомов при образовании фуллерена C₆₀-I_h

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

alexsinita91@gmail.com

¹ ООО "Лаборатория Кинтех", Москва, Россия

² НИЦ Курчатовский Институт, Москва, Россия

³ Институт спектроскопии РАН, Троицк, Россия

Несмотря на более чем сорокалетнюю историю изучения фуллерена C₆₀ с икосаэдральной симметрией (C₆₀-I_h), атомистический механизм, объясняющий высокий выход именно данного изомера в условиях высокотемпературного синтеза, до настоящего времени не установлен однозначно. Ранее нашей группой был предложен новый атомистический механизм, включающий миграцию sp-атомов и аннигиляцию пар таких атомов с образованием sp²-структуры [1-3]. Энергетика и кинетика направленной миграции одиночных sp-атомов углерода в sp²-структуре фуллерена от случайного начального положения к месту аннигиляции (соответствующего минимуму энергии) исследованы с помощью многомасштабного моделирования. А именно, энергетические барьеры всех различных элементарных шагов миграции определены методом теории функционала плотности, а температурная зависимость характерных времён миграции sp-атомов получена с помощью оригинальной модели, разработанной на основе метода Монте-Карло. В качестве модельной системы рассмотрен фуллерен C₅₈-C_{2v} как структурный предшественник фуллерена C₆₀-I_h. Полученная зависимость времени миграции от температуры согласуется с экспериментальным временем образования фуллеренов и позволяет количественно оценить роль миграции sp-атомов в ранее предложенном механизме образования бездефектного изомера C₆₀-I_h [1-3].

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (проекты № 22-73-00023, <https://rscf.ru/project/22-73-00023/>, и №. 23-42-10010, <https://rscf.ru/en/project/23-42-10010>).

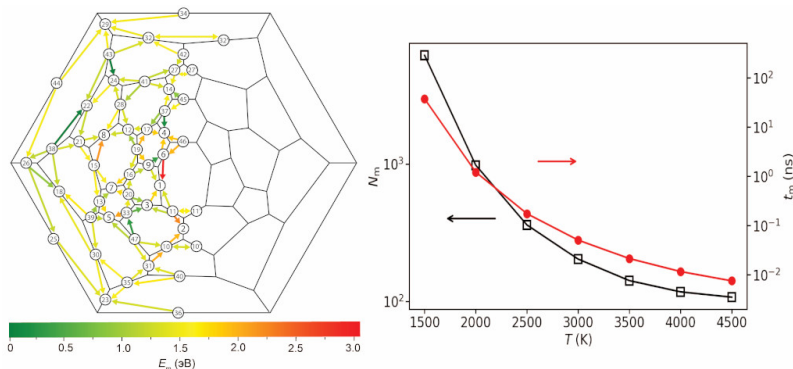


Рис. 1. Диаграмма изомера фуллерена C₅₈-C_{2v} с рассчитанными значениями барьера миграции sp-атома E_m (слева). Зависимости характерного времени и числа шагов миграции sp-атома по поверхности фуллерена C₅₈-C_{2v} от температуры (справа).

Ссылки

1. A. M. Popov, I. V. Lebedeva, S. A. Vyrko, N. A. Poklonski. Fullerenes, Nanotubes and Carbon Nanostructures (2021) **29(10)**, 755-766.
2. A. S. Sinita, I. V. Lebedeva, Y. G. Polynskaya, A. M. Popov, A. A. Knizhnik. The Journal of Physical Chemistry C (2020) **124(21)**, 11652-11661.
3. A. S. Sinita, Y. G. Polynskaya, N. A. Matsokin, Y. M. Kedalo, A. A. Knizhnik, A. M. Popov. Physical Chemistry Chemical Physics (2024) **26(32)**, 21905-21911.