

МЕХАНИКА

УДК 531.352

DOI 10.17223/19988621/73/4

А.М. Бубенчиков, М.А. Бубенчиков, Д.В. Мамонтов,
Д.С. Капарулин, А.В. Лун-Фу

ВРАЩЕНИЯ ТОРОВ В СТРУКТУРЕ ЖИДКОГО КРИСТАЛЛА¹

Рассмотрено движение крупных молекул углерода, представляющих из себя наноторы. Эти объекты находятся в колончатой фазе жидкого кристалла. Выделен минимальный фрагмент жидкокристаллической фазы. Анализируется динамическое состояние типичной молекулы рассматриваемой структуры.

Ключевые слова: наноматериалы, математическое моделирование, молекулярная динамика, наноторы, углеродные материалы, поверхностные материалы.

Наноторы как углеродные конструкции сами по себе представляют научный интерес, поскольку сами торы являются поверхностными кристаллами. Во многих теоретических работах с позиций кристаллографии исследуются геометрические характеристики атомной конструкции наноторов. Работа [1] посвящена стабильности формирования идеального углеродного тора. В [2] рассмотрены группы симметрии идеальных наноторов. Авторами [3] использованы методы атом-атомных взаимодействий для описания конструкций наноторов C_{180} , C_{270} , C_{360} , C_{750} . В [4] говорится о применениях наноторов в качестве датчиков электрических сигналов, а также для захвата и регистрации отдельных атомов и их ионов. Авторами [5] на основе концепции фактор-пространства строится геометрическая модель нанотора и с использованием методов алгебры и теории многообразий проводится анализ симметрии разработанных геометрических моделей. В [6] рассмотрено электрическое сопротивление наноторов при их контакте с одностенными углеродными нанотрубками, а в [7] – колебательные гармоники углеродных торов. Исследования, представленные в обзоре [8] классифицированы по группам: конструкция, моделирование и приложения. В [9] говорится о возможном использовании наноторов в качестве высокочастотных генераторов. Авторами [10] рассмотрены борные аналоги наноторов, а в [11–13] определены магнитные моменты тороидальных конструкций. Из представленного краткого обзора следует, что теоретические работы по молекулярным структурам на основе торов отсутствуют. Авторы настоящей работы имели положительный опыт моделирования структур на основе фуллеренов, а также пластинок B_{42} [14–17].

¹ Исследование выполнено при финансовой поддержке гранта РФФИ № 19-71-10049.

Рассматривается элементарный фрагмент пластического кристалла с первоначально гексагональной укладкой столбцов. Центральный столбец имеет пять торов. Столбцы окружения – по четыре тора. Бублики стержневого столбца попадают в углубления между торами столбцов окружения. В результате имеется симметрично расположенный тор в центре фрагмента и 28 торов окружения. На рис. 1 показан элементарный фрагмент (вид сверху). Здесь же серым цветом показаны позиции центра масс бублика, находящегося в середине стержневого столбца. Расчетным образом определяются кинематические и динамические характеристики трех центральных и симметрично расположенных торов. Целью настоящей работы является получение устойчивости положений торов в элементарном фрагменте жидкого кристалла и анализ их вращений в самосогласованном поле окружающих тороидальных молекул.

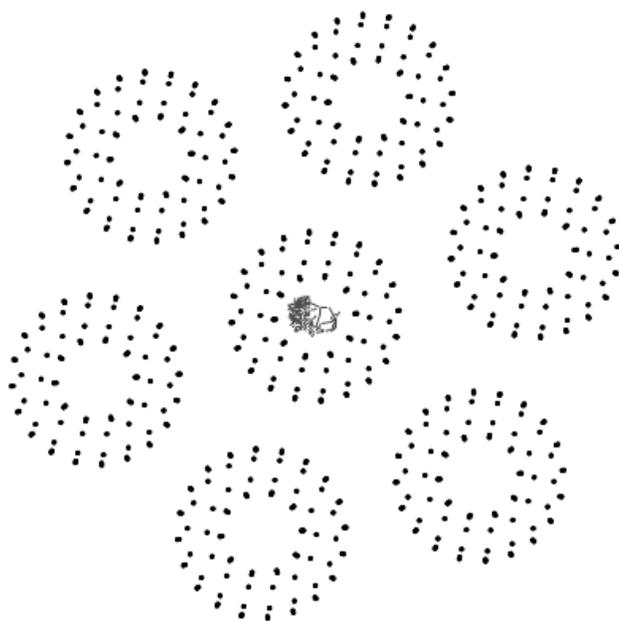


Рис. 1. Гексагональная структура наноторов (вид сверху)

Fig. 1. Hexagonal structure of nanotori (top view)

Математическая модель

Чтобы описать вращательное движение молекулы нанотора вокруг ее собственного центра масс, используется проекция уравнения момента количества движения на подвижные оси, связанные с этим объектом:

$$\begin{aligned}
 A \frac{dp}{dt} + (C - B)qr &= M_{\xi}, \\
 B \frac{dq}{dt} + (A - C)pr &= M_{\eta}, \\
 C \frac{dr}{dt} + (B - A)pq &= M_{\zeta}.
 \end{aligned}
 \tag{1}$$

Здесь p, q, r – проекции угловой скорости на оси подвижной системы отсчета $C\xi\eta\zeta$; A, B, C – главные моменты инерции молекулы для её центра масс. Проекции моментов сил на оси системы координат $C\xi\eta\zeta$, связанные с центральным тором, определяются следующим образом:

$$\begin{aligned} M_\xi &= a_{11}M_x + a_{12}M_y + a_{13}M_z, \\ M_\eta &= a_{21}M_x + a_{22}M_y + a_{23}M_z, \\ M_\zeta &= a_{31}M_x + a_{32}M_y + a_{33}M_z, \end{aligned} \quad (2)$$

где $\{a_{ij}\} (i, j = 1, 3)$ – матрица направляющих косинусов, связывающая неподвижную и подвижную декартовы системы координат; M_x, M_y, M_z – проекции моментов сил на неподвижные оси координат;

$$\mathbf{M} = \sum_{k=1}^S \mathbf{M}_k, \quad \mathbf{M}_k = [\mathbf{r}_{kC}, \mathbf{F}_k] = \begin{vmatrix} \mathbf{i} & \mathbf{j} & \mathbf{k} \\ x_{kC} & y_{kC} & z_{kC} \\ X_k & Y_k & Z_k \end{vmatrix}. \quad (3)$$

Здесь \mathbf{M}_k – момент равнодействующей всех ван-дер-ваальсовских сил, действующих на k -й атом молекулы, взятый относительно центра масс молекулы; \mathbf{r}_{kC} – радиус-вектор атома относительно центра масс молекулы C_{158} ; $\mathbf{i}, \mathbf{j}, \mathbf{k}$ – орты неподвижной системы координат.

Тогда величины силовых воздействий на отдельный атом нанотора можно определить следующим образом:

$$X_k = -\sum_{j=1}^{N_p} \frac{\partial U}{\partial x}(\rho_{kj}), \quad Y_k = -\sum_{j=1}^{N_p} \frac{\partial U}{\partial y}(\rho_{kj}), \quad Z_k = -\sum_{j=1}^{N_p} \frac{\partial U}{\partial z}(\rho_{kj}). \quad (4)$$

Здесь X_k, Y_k, Z_k – проекции равнодействующей всех сил на оси неподвижной системы отсчета; N_p – количество атомов в окружающих торах; ρ_{kj} – расстояния между k -м атомом центрального тора и j -м атомом окружения. Уравнения (2) замыкаются кинематическими соотношениями, связывающими проекции вектора мгновенной угловой скорости с углами Эйлера и их производными:

$$\begin{aligned} p &= \dot{\psi} \sin \theta \sin \varphi + \dot{\theta} \cos \varphi, \\ q &= \dot{\psi} \sin \theta \cos \varphi - \dot{\theta} \sin \varphi, \\ r &= \dot{\psi} \cos \theta + \dot{\varphi}. \end{aligned} \quad (5)$$

Уравнения (2) и (5) интегрируются при следующих начальных условиях:

$$t = 0; \quad p = q = r = 0; \quad \varphi = \psi = 0; \quad \theta = \pi/2. \quad (6)$$

Последнее равенство в (6), нарушающее однородность условий, берется для того, чтобы отойти от координатной особенности, которая имеется в уравнениях (5) при $\theta = 0, \pm\pi, \pm 2\pi$ и т.д.

Типичный тор, находящийся в центре выделенного кристаллического фрагмента, будет представлен совокупностью 158 атомов углерода. Таким образом, эти атомы будут являться силовыми центрами и результирующие воздействия окружения будут направлены в позиции отдельных атомов. Суммируя все эти воздействия, можно найти главный вектор внешних сил, который по теореме о движении центра масс объекта будет пропорционален его ускорению:

$$M \frac{d\mathbf{v}_c}{dt} = - \sum_{j=1}^{N_p} \sum_{k=1}^S \nabla U(\rho_{jk}), \frac{d\mathbf{r}_c}{dt} = \mathbf{v}_c. \quad (7)$$

Здесь M – масса тора; v_c – скорость центра масс перемещающейся молекулы; $S = 158$ – число атомов в молекуле; $\rho_{jk} = \rho_{kj}$; $U(\rho_{jk})$ – LJ-потенциал атом-атомного взаимодействия; ∇ – оператор градиента, индекс «с» определяет центр вращающегося тора.

Система векторных уравнений (7) может интегрироваться со следующими простейшими начальными условиями:

$$t = 0, \mathbf{v}_c = \mathbf{v}_c^0, \mathbf{r}_c = 0. \quad (8)$$

Здесь \mathbf{r}_c – радиус-вектор центра масс молекулы; \mathbf{v}_c^0 – начальная тепловая скорость молекулы.

Численная реализация математической модели и результаты расчетов

В основу математической модели положены атом-атомные взаимодействия атомов, находящихся в поверхностных структурах различных торов. Центральный тор имеет особый статус, поскольку его центр масс является центром симметрии фрагмента структуры. Отсутствие в молекулярной системе ковалентных связей дает возможность наноторам вращаться и участвовать в поступательных перемещениях вместе с центром масс. Для описания вращательного движения молекул используется подход Эйлера. Поступательные перемещения молекул определяются на основе теоремы о движении центра масс молекулярной частицы. Система обыкновенных дифференциальных уравнений второго порядка, определяющих динамику молекулярного кластера обычным приемом, сводится к системе уравнений первого порядка, которая интегрируется с использованием пошаговых методов высокого порядка точности. Все расчеты проведены с постоянным шагом интегрирования по времени $\Delta t = 10^{-6}$ нс. Рассмотрим некоторые результаты расчетов динамики центрального тора.

На рис. 2 приведены распределения кинематических характеристик типичного тора гексагональной столбчатой структуры. В центральном столбце этой структуры три смежных тора являются подвижными, положения других торов окружения зафиксированы.

Как следует из рис. 2, *a* среднее значение скорости центра масс составляет величину $v_c = 60$ м/с. Это значение отвечает колебательной температуре молекул $T = 290$ К. На рис. 2, *b* показаны координаты центра масс тора, находящегося в середине выделенного фрагмента структуры. Видно, что тор покидает изначальное симметричное положение, поскольку черная кривая колеблется около значения 0.1 нм. Из рис. 2, *c* видно, что одна из проекций угловой скоростей, а именно проекция на главную ось тора, на достаточно продолжительных интервалах принимает значения определенного знака. Последнее выражается в том (рис. 2, *d*), что угол собственного вращения тора изменяется более плавно и с большой амплитудой, а период его изменения составляет величину около 0.25 нс. В связи с этим главная частота колебаний тора C_{158} составляет величину 4 ГГц.

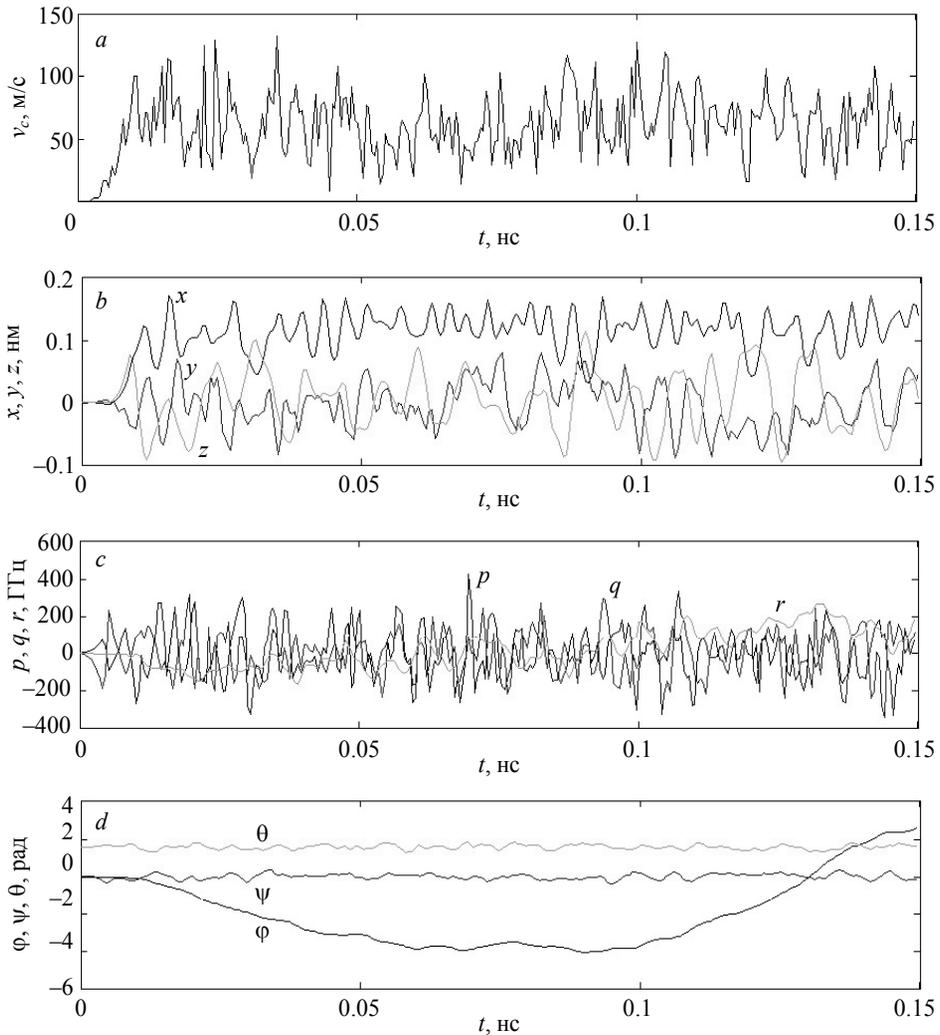


Рис. 2. Кинематические характеристики центрального тора: *a* – величина скорости движения центра масс тора, *b* – координаты центра масс, *c* – проекции вектора угловой скорости, *d* – углы Эйлера

Fig. 2. Kinematic characteristics of the central torus: (*a*) velocity magnitude for the torus center of mass, (*b*) coordinates of the center of mass, (*c*) projections of the angular velocity vector, and (*d*) the Euler angles

Заключение

Классический алгоритм атом-атомных взаимодействий применен к моделированию динамики наноторов в колончатых структурах. Расчеты показывают, что типичный тор рассматриваемой структуры совершает вокруг собственной оси угловые колебания с амплитудой по углу больше одного оборота и имеет определенную частоту этих колебаний. Таким образом, жидкий кристалл, составленный торами C_{158} может выступать генератором колебаний в гигагерцовом диапазоне.

ЛИТЕРАТУРА

1. *Chang I-L., Chou J-W.* A molecular analysis of carbon nanotori formation // *Journal of Applied Physics*. 2012. V. 112. P. 063523. DOI: 10.1063/1.4754538.
2. *Staic M., Petrescu-Nita A.* Symmetry group of two special types of carbon nanotori // *Acta Cryst. Section A. Foundations of Cryst.* V. 69. P. 435–439. 2013. DOI: 10.1107/S0108767313010325.
3. *Tasci E., Yazgan E., Malcioglu O.B., Erkoq S.* Stability of carbon nanotori under head treatment: molecular-dynamics simulations // *Fullerenes, Nanotubes and Carbon Nanostructures*. 2005. V. 13(2). P. 147–154. DOI: 10.1081/FST-200050695.
4. *Kharissova O.V., Castanon M.G., Kharisov B.I.* Inorganic nanorings and nanotori: State of the art. // *Journal of Materials Research*. 2019. V. 34(24). P. 3998–4010. DOI: 10.1557/jmr.2019.370.
5. *Loyola M., Santoso E.B., Estrada G.* A quotient space approach to model nanotori and determine their symmetry groups // *Journal of Applied Physics Conference Proceedings*. 2014. V. 1602(1). P. 620–626. DOI: 10.1063/1.4882549.
6. *Chou Y.Y., Guo G.-Y.* Electrical conductance of carbon nanotori in contact with single-wall carbon nanotubes // *Journal of Applied Physics*. 2004. V. 96. P. 2249. DOI: 10.1063/1.1766415.
7. *Faraji U.M., Alaeiyan M., Golriz M., Gilani A.* Harmonic indices of polyhex zigzag TUZC 6 [m;n] nanotube and nanotori // *Journal of Information and Optimization Science*. V. 41(4). P. 1–8. 2020. DOI: 10.1080/02522667.2020.1744309.
8. *Sarapat P., Hill J.M., Baowan D.* A review of geometry, construction and modelling for carbon nanotori // *Appl. Sci.* 2019. V. 9(11). P. 2301. DOI: 10.3390/app9112301.
9. *Hilder T.A., Hill J.M.* Orbiting atoms and C60 fullerenes inside carbon nanotori // *Journal of Applied Physics*. 2007. V. 101. P. 064319. DOI: 10.1063/1.2511490.
10. *Dadashev V., Gindulyte A., Lipscomb W.N., Massa L., Squire R.H.* Proposed new materials: boron fullerenes, nanotubes, and nanotor // *ACS Symposium Series*. 2002. P. 79–102. DOI: 10.1021/bk-2002-0827.ch005.
11. *Liu C.P., Chen H.B., Ding J.W.* Magnetic response of carbon nanotori: the importance of curvature and disorder // *Journal of Physics: Condensed Matter*. 2007. V. 20. DOI: 10.1088/0953-8984/20/01/015206.
12. *Low Y., McGuigan M.* Visualization and simulation of the material properties of carbon nanotori // *New York Scientific Data Summit (NYSDDS)*. 2016. V. 1-4. DOI: 10.1109/NYSDDS.2016.7747824.
13. *Liu L., Gui G.Y., Jayanthi C.S., Wu S.Y.* Colossal paramagnetic moments in metallic carbon nanotori // *Physical Review Letters*. 2002. V. 88(21). DOI: 10.1103/PhysRevLett.88.217206.
14. *Bubenchikov A.M., Bubenchikov M.A., Mamontov D.V., Lun-Fu A.V.* Md-simulation of fullerene rotations in molecular crystal fullerite // *Crystals*. 2019. V. 9. Art. 496. DOI: 10.3390/cryst9100496.
15. *Bubenchikov A., Bubenchikov M., Mamontov D.* The dynamic state of a pseudo-crystalline structure of B₄₂ molecules // *Crystals*. 2020. V. 10. Art. 510. DOI: 10.3390/cryst10060510.
16. *Bubenchikov M.A., Bubenchikov A.M., Tarasov E.A., Usenko O.V., Chelnokova A.S.* Calculating permeability of the low-temperature phase of a fullerite // *Diamond and Related Materials*. V. 86. P. 146–180. 2018. DOI: 10.1016/j.diamond.2018.04.017.
17. *Bubenchikov A.M., Bubenchikov M.A., Jambaa S., Lun-Fu A.V., Chelnokova A.S.* Low-temperature separation of helium-helion mixture // *Rev. on Adv. Materials Science*. 2020. V. 59(1). P. 361–370. DOI: 10.1515/rams-2020-0004.

Поступила в редакцию: 09.04.2021

Bubenchikov A.M., Bubenchikov M.A., Mamontov D.V., Kaparulin D.S., Lun-Fu A.V. (2021) ROTATIONS OF TORI IN A LIQUID CRYSTAL STRUCTURE. *Vestnik Tomskogo gosudarstvennogo universiteta. Matematika i mekhanika* [Tomsk State University Journal of Mathematics and Mechanics]. 73. pp. 42–49

DOI 10.17223/19988621/73/4

Keywords: nanomaterials, mathematical modeling, molecular dynamics, nanotori, carbon materials, surface materials.

Liquid crystals are a collection of flattened molecules. On the one hand, they have a well-defined structure, on the other hand, this structure is deformable, since its elements can change their position in space. In columnar structures, consisting of disks, plates, and tori, the fluid lines and cords are distinguished. In the case of tori and circular disks, a hexagonal structure of the arrangement of molecules is observed in a combination of the cord.

The aim of this work is to obtain the stability of tori positions in an elementary fragment of a liquid crystal and to analyze their rotations in a self-consistent field of the surrounding toroidal molecules. To solve this problem, the method of mathematical modeling was used, based on classical models of molecular dynamics. The calculation is carried out on the basis of the model of cross-atom-atom interactions for molecular tori. The minimal fragment of the cord is selected, which makes it possible to determine the characteristic dynamic state of the central torus in the fragment. To describe the motion of the molecular tori, the equations of motion for their centers of mass and the Euler equations for their angular displacements are used. The minimal fragment of the material contains twenty-nine tori. The equations for displacements of the centers of mass of the tori are initially represented as ordinary differential equations of the second order. However, by introducing fictitious points into the consideration of velocities, they can be reduced to a system of first-order equations with a doubled number of lower-order equations. The resulting system of the first-order differential equations is integrated numerically using a high-order accuracy step-by-step scheme. All calculations are performed with a constant time step. The accuracy of the obtained numerical results is verified in terms of the balance of total energy of the system. Calculations show that the central torus of the presented fragment executes angular oscillations around its main axis with amplitude of more than one revolution. Thus, the performed calculations show that a representative fragment of the liquid crystal structure of molecular tori can be used as a generator of high-frequency mechanical vibrations.

Financial support. This work was partially supported by the Russian Science Foundation (project No. 19-71-10049).

Aleksey M. BUBENCHIKOV (Doctor of Physics and Mathematics, Tomsk State University, Tomsk, Russian Federation). E-mail: bubenchikov_am@mail.ru

Mikhail A. BUBENCHIKOV (Doctor of Physics and Mathematics, Tomsk State University, Tomsk, Russian Federation). E-mail: michael121@mail.ru

Dmitriy V. MAMONTOV (Tomsk State University, Tomsk, Russian Federation). E-mail: orevaore@mail.ru

Dmitriy S. KAPARULIN (Candidate of Physics and Mathematics, Tomsk State University, Tomsk, Russian Federation). E-mail: dsc@phys.tsu.ru

Aleksandr V. LUN-FU (Lead Engineer, OOO Gazprom Transgaz Tomsk, Tomsk, Russian Federation). E-mail: a.Lun-Fu@gtt.gazprom.ru

REFERENCES

1. Chang I-L., Chou J-W. (2012) A molecular analysis of carbon nanotori formation. *Journal of Applied Physics*. 112(6). Article 063523. DOI: 10.1063/1.4754538.
2. Staic M., Petrescu-Nita A. (2013) Symmetry group of two special types of carbon nanotori. *Acta Crystallographica. Section A. Foundations of Crystallography*. 69. pp. 435–439. DOI: 10.1107/S0108767313010325.
3. Tasci E., Yazgan E., Malcioglu O.B., Erkoq S. (2005) Stability of carbon nanotori under head treatment: molecular-dynamics simulations. *Fullerenes, Nanotubes and Carbon Nanostructures*. 13(2). pp. 147–154. DOI: 10.1081/FST-200050695.
4. Kharissova O.V., Castanon M.G., Kharisov B.I. (2019) Inorganic nanorings and nanotori: State of the art. *Journal of Materials Research*. 34(24). pp. 3998–4010. DOI: 10.1557/jmr.2019.370.
5. Loyola M., Santoso E.B., Estrada G. (2014) A quotient space approach to model nanotori and determine their symmetry groups. *AIP Conference Proceedings*. 1602(1). pp. 620–626. DOI: 10.1063/1.4882549.
6. Chou Y.Y., Guo G.-Y. (2004) Electrical conductance of carbon nanotori in contact with single-wall carbon nanotubes. *Journal of Applied Physics*. 96(4). Article 2249. DOI: 10.1063/1.1766415.
7. Faraji U.M., Alaeiyan M., Golriz M., Gilani A. (2020) Harmonic indices of polyhex zigzag TUZC₆ [m;n] nanotube and nanotori. *Journal of Information and Optimization Science*. 41(4). pp. 1–8. DOI: 10.1080/02522667.2020.1744309.
8. Sarapat P., Hill J.M., Baowan D. (2019) A review of geometry, construction and modelling for carbon nanotori. *Applied Science*. 9(11). Article 2301. pp. 1–20. DOI: 10.3390/app9112301.
9. Hilder T.A., Hill J.M. (2007) Orbiting atoms and C60 fullerenes inside carbon nanotori. *Journal of Applied Physics*. 101(6). Article 064319. DOI: 10.1063/1.2511490.
10. Dadashev V., Gindulyte A., Lipscomb W.N., Massa L., Squire R.H. (2002) Proposed new materials: boron fullerenes, nanotubes, and nanotor. *Structures and Mechanisms. ACS Symposium Series*. pp. 79–102. DOI: 10.1021/bk-2002-0827.ch005.
11. Liu C.P., Chen H.B., Ding J.W. (2007) Magnetic response of carbon nanotori: the importance of curvature and disorder. *Journal of Physics: Condensed Matter*. 20(1). DOI: 10.1088/0953-8984/20/01/015206.
12. Low Y., McGuigan M. (2016) Visualization and simulation of the material properties of carbon nanotori. *New York Scientific Data Summit (NYSDS)*. pp. 1–4. DOI: 10.1109/NYSDS.2016.7747824.
13. Liu L., Gui G.Y., Jayanthi C.S., Wu S.Y. (2002) Colossal paramagnetic moments in metallic carbon nanotori. *Physical Review Letters*. 88(21). Article 217206. DOI: 10.1103/PhysRevLett.88.217206.
14. Bubenchikov A.M., Bubenchikov M.A., Mamontov D.V., Lun-Fu A.V. (2019) Mdsimulation of fullerene rotations in molecular crystal fullerite. *Crystals*. 9(10). Article 496. pp. 1–17. DOI: 10.3390/cryst9100496.
15. Bubenchikov A., Bubenchikov M., Mamontov D. (2020) The dynamic state of a pseudo-crystalline structure of B₄₂ molecules. *Crystals*. 10(6). Article 510. pp. 1–10. DOI: 10.3390/cryst10060510.
16. Bubenchikov M.A., Bubenchikov A.M., Tarasov E.A., Usenko O.V., Chelnokova A.S. (2018) Calculating permeability of the low-temperature phase of a fullerite. *Diamond and Related Materials*. 86. pp. 146–180. DOI: 10.1016/j.diamond.2018.04.017.
17. Bubenchikov A.M., Bubenchikov M.A., Jambaa S., Lun-Fu A.V., Chelnokova A.S. (2020) Low-temperature separation of helium-helion mixture. *Review on Advanced Materials Science*. 59(1). pp. 361–370. DOI: 10.1515/rams-2020-0004.

Received: April 9, 2021