

ОПТИКА И СПЕКТРОСКОПИЯ

УДК 539.182

DOI: 10.17223/00213411/65/1/156

СОСТОЯНИЕ АТОМА ГЕЛИЯ ВНУТРИ ФУЛЛЕРЕНА*

В.А. Потеряева, М.А. Бубенчиков, А.М. Бубенчиков, А.И. Потекаев, Д.С. Капарулин

Национальный исследовательский Томский государственный университет, г. Томск, Россия

Рассмотрена задача о движении атома гелия внутри молекулы фуллерена при сверхнизких температурах. Решение уравнения Шредингера получено с использованием специальных функций и численных методов. Потенциальная энергия взаимодействия фуллереновой частицы с атомом гелия вычислена путем интегрирования модифицированного потенциала Леннарда-Джонса по идеализированной поверхности полый наночастицы. В результате вычислений найдены и визуализированы области наиболее вероятной локализации атомной частицы, находящейся в состоянии (n, m, k_n) , внутри фуллерена C_{60} .

Ключевые слова: квантовый ротатор, фуллерен, волновая динамика, уравнение Шредингера.

Введение

Одна из самых интересных и полезных особенностей фуллеренов состоит в том, что их структура, похожая на углеродную клетку, способна накапливать внутри атомы и даже маленькие молекулы аналогично нанокapsулам [1–3]. Разработаны различные методы создания фуллеренов (endohedral fullerenes and endofullerenes), содержащих внутри компоненты газов, например, гелия [4–8]. Таким образом, молекулы фуллерена могут быть использованы в медицине и фармацевтике для контроля связывания лекарств с белками (drug binding), подавления активности вирусов (inhibit the activity of the virus), транспортировки больших биомолекул, а также транспортировки и хранения редких газов [9].

Следовательно, необходимо исследовать поведение и свойства атомов и молекул внутри фуллерена. Так, в работах [10–12] детально исследовано вращение молекулы водорода внутри C_{60} . В [13] получены данные о вращении молекулы воды, заключенной внутри фуллереновой клетки C_{60} . Авторы работы [14] исследовали центральные столкновения $He@C_{60} + He@C_{60}$ и обнаружили, что при определенной энергии (incident energy) внедренный в фуллерен атом гелия может повысить стабильность образующейся димерной структуры. В [15] было изучено поведение и характеристики различных комплексов, помещенных внутрь фуллереновых и фуллереноподобных структур. Взяв за основу конструкцию фуллерена, была построена такая же структура, но из атомов гелия, для изучения электронов [16]. Изучение вращения фуллерена в кристаллах фуллерита приведено в [17]. Кроме того, ранее получены результаты распределения гелия и водорода в области мембраны, состоящей из двух моноатомных углеродных слоев [18–21].

В данной работе описана математическая технология нахождения квантовых чисел в задаче о ротаторе. Из уравнения Шредингера найдена вероятность нахождения атомов гелия в состоянии, характеризующемся тремя числами n , m и k_n . Визуализированы их области локализации внутри поверхностного кристалла фуллерена C_{60} .

Уравнение для волновой функции

Обычно под задачей о квантовом ротаторе понимают описание движения волн в сферическом слое. Известно также, что у фуллерена C_{60} средние положения атомов углерода находятся на сфере радиуса 0.357 нм. С уменьшением температуры тепловые колебания атомов становятся все меньше и их мгновенные положения – все ближе к средним позициям. В этом отношении вполне допустимой является сферическая форма молекулы C_{60} . Однако из-за определенного расположения атомов на молекулярной сфере потенциальное поле взаимодействия с пробной частицей (волной)

* Работа была выполнена при поддержке Российского научного фонда (проект № 21-71-10066).

Уважаемые читатели!

Доступ к полнотекстовой версии журнала
«Известия высших учебных заведений. Физика»
осуществляется на платформе
Научной электронной библиотеки eLIBRARY.RU
на платной основе:

<https://elibrary.ru/contents.asp?titleid=7725>