

Научная статья

УДК 531.352

doi: 10.17223/19988621/77/5

Относительная динамика оболочек бифуллеренового комплекса

Михаил Алексеевич Бубенчиков¹,
Дмитрий Владимирович Мамонтов², Анна Сергеевна Челнокова³

^{1, 2, 3} Томский государственный университет, Томск, Россия

¹ michael121@mail.ru

² orevaore@mail.ru

³ smolina-nyuta@mail.ru

Аннотация. С использованием динамических уравнений Эйлера, а также уравнений движения центров масс рассматриваемых фуллеренов разработана вычислительная процедура для анализа динамического состояния углеродного комплекса $C_{80}@C_{320}$. Силовые характеристики углеродных молекул найдены в рамках подхода перекрестных атом-атомных взаимодействий. Расчетами показана глобальная стабильность вращательного движения инкапсулированного фуллерена относительно поступательных перемещений внешней оболочки.

Ключевые слова: численное моделирование, молекулярная динамика, фуллерены

Благодарности: Исследование выполнено при финансовой поддержке гранта РНФ № 21-71-10066.

Для цитирования: Бубенчиков М.А., Мамонтов Д.В., Челнокова А.С. Относительная динамика оболочек бифуллеренового комплекса // Вестник Томского государственного университета. Математика и механика. 2022. № 77. С. 54–67. doi: 10.17223/19988621/77/5

Original article

Relative dynamics of shells of a bifullerene complex

Mikhail A. Bubenchikov¹, Dmitriy V. Mamontov², Anna S. Chelnokova³

^{1, 2, 3} Tomsk State University, Tomsk, Russian Federation

¹ michael121@mail.ru

² orevaore@mail.ru

³ smolina-nyuta@mail.ru

Abstract. In this work, mathematical modeling of relative dynamics of a bifullerene complex is carried out on the assumption that the inner shell does not form covalent bonds with an outer carbon skeleton. This fact enables free angular movements of the inner

shell. In particular, the directed rotation of the inner fullerene can be provided. This, in turn, allows for accumulating of a significant fraction of kinetic energy at internal degrees of freedom of the complex under consideration. In this case, the direction of rotations is not related to temperature; the outer shell of the complex restrains the transfer of the stored energy into thermal vibrations. Therefore, calculations are performed to estimate the stability of the rotational motion of an encapsulated fullerene relative to translational displacements of the outer shell. The calculations are carried out using a separate description of the dynamics of closed carbon molecules in terms of translational and rotational displacements. Translational displacements are determined using the equations of motion for the centers of mass of molecules. Rotational displacements are found on the basis of the dynamic Euler equations. The power centers in the considered framework structures of the molecules are carbon atoms. Therefore, the strength characteristics of intermolecular interactions are obtained in accordance with an atom-atom approach. In this case, the interaction parameters of individual atoms correspond to the case when these atoms are located in a structure of the surface carbon crystal.

Keywords: numerical modeling, molecular dynamics, fullerenes

Acknowledgments: This work was partially supported by the Russian Science Foundation (project No. 21-71-10066).

For citation: Bubenchikov, M.A., Mamontov, D.V., Chelnokova, A.S. (2022) Relative dynamics of shells of a bifullerene complex. *Vestnik Tomskogo gosudarstvennogo universiteta. Matematika i mekhanika – Tomsk State University Journal of Mathematics and Mechanics*. 77. pp. 54–67. doi: 10.17223/19988621/77/5

Введение

В последнее время вызывает большой интерес динамическое состояние различных молекул, инкапсулированных в углеродную оболочку. В работе [1] выполнен анализ поступательного и вращательного движения молекулы метана внутри фуллерена, имеющего отверстие, через которое был введен CH_4 внутри кристаллической оболочки. В [2] представлены данные о движении и вращении молекул H_2 , заключенных в C_{60} . В исследовании [3] продемонстрирован механизм, основанный на вращении треугольного кластера Sc_3N в икосаэдрической клетке фуллерена C_{80} . В [4] на основе экспериментальных данных о вращающихся фуллеренах в пластической фазе фуллерита изучены низкоэнергетические электронные состояния вращающегося C_{60} . В [5] продемонстрировано, что димеры фуллерена C_{70} свободно вращаются вокруг короткой оси молекулы. В работе [6] с использованием электронной микроскопии высокого разрешения изучено вращение фуллеренов в стручковых структурах, в которых роль оболочки выполняла открытая нанотрубка. В [7] рассмотрены устойчивость комплекса $\text{C}_{20}@\text{C}_{80}$ и вращение C_{20} внутри него на основе модели сильных взаимодействий электронов. Наряду с этим в [8] исследованы атомная и электронная структуры фуллерена C_{28} в свободном состоянии, а также в случае, когда этот фуллерен инкапсулирован в замкнутую капсулу C_{450} . Показано, что C_{28} в поле удерживающего потенциала трубки имеет квантованное вращательное движение около оси симметрии капсулы. В [9] рассмотрено вращение фуллереновых ионов. В [10] продемонстрировано, что за счет взаимодействия лазерных импульсов приводятся во вращение молекулы C_{70} , обладающие собственной поляризацией и находящиеся в растворах фуллеренов. В [11] проанализировано влияние размера функ-

циональной группы на подвижность электронов в фуллереновых клетках, находящихся в пленках их производных. В [12] проведены расчеты основного спектра колебательно-вращательных движений в ГЦК фуллереновых решетках. В [13] предложена теория трансляционно-вращательной связи с позиции макроскопического гамильтониана и свободной энергии Ландау. Необходимо отметить, что C_{20} далеко не всегда свободно вращается в углеродных структурах.

Целая серия современных работ посвящена воздействию излучения на фуллерены. При этом поглощенная энергия излучения приводит к образованию вакансий либо интенсификации вращательного движения фуллеренов. По данным [14], для нанотрубок размером 0.85 и 1.2 нм энергия образования вакансий соответственно составила 5.98 и 7.44 эВ, а для фуллеренов C_{20} , C_{30} , C_{60} , C_{80} , C_{180} , C_{240} и C_{450} – 2.91, 2.92, 9.2, 5.95, 8.09, 8.53 и 7.41 эВ. В [15] исследована ионизация икосаэдрических фуллеренов C_{20} , C_{80} и C_{180} в интенсивном лазерном импульсе с использованием теории S -матрицы. При этом поглощение излучения также способствовало увеличению скорости вращения фуллеренов.

Интересными являются работы по изучению гибридных структур и комплексов, содержащих фуллерены. В [16] приведены расчеты для модельных нанотрубок, связанных с C_{84} , C_{96} и C_{80} . Ковалентные связи делают рассматриваемые гибридные структуры из нанотрубок и крышек фуллеренов C_{36} , C_{32} и C_{20} связанными в одно целое. В [17] установлено, что нейтронное рассеяние дает прямое доказательство свободного вращения фуллеренов и либрации кубанов в высокотемпературной фазе сокристалла фуллерен–кубан (C_{60} , C_3H_8). В [18] изучено воздействие фуллерена на однослойный графеновый лист. Стручковые структуры, где в качестве оболочек выступают открытые нанотрубки, очень интересны с точки зрения изучения вращения фуллеренов. В [19] обнаружено, что инкапсулированные фуллерены могут свободно вращаться в пространстве трубки (10,10) при комнатной температуре. Кроме того, расчеты показывают, что, в отличие от металлического реарод $C_{60}@ (10,10)$ с несколькими несущими, реарод $C_{60}@ (17,0)$ является полупроводником. В результате получены так называемые фуллереновые стручки. В [20] исследованы структура вращательного низкоэнергетического спектра собственных значений и собственная функция эндоэдральных фуллереновых комплексов C_{60} ; рассмотрены системы $Li + \&C_{60}$, $Na + \&C_{60}$, $CoCo\&C_{60}$ и $LiLi\&C_{60}$. В [21] описаны исследования динамики вращения C_{60} в многослойных фуллереновых пленках, выращенных на поверхности $WO_2/W(110)$.

Если среда составлена крупными углеродными молекулами, например C_{320} , то при комнатных температурах мы получим сыпучую среду – порошок. Из-за наноскопических размеров исходных частиц такая среда будет обладать уникальными физическими свойствами. Если при этом C_{320} использовать как оболочку и поместить в нее фуллерен C_{80} , то полученная новая среда будет обладать удивительной способностью накапливать механическую энергию на внутренних вращательных степенях свободы. В настоящей работе мы попытались оценить потенциальные возможности такой системы частиц. Оценка заключалась в проведении молекулярно-динамических расчетов состояния углеродного комплекса $C_{80}@C_{320}$ и определении способности инкапсулированного фуллерена сохранять начальное вращение в присутствии тепловых колебаний оболочки, отвечающих уровню комнатной температуры. Опыт моделирования подобных систем представлен в работах [22–24].

Математическая модель и метод ее реализации

Проекции сил, действующих между фуллеренами, определяются в рамках модели атом-атомных взаимодействий. Согласно этой модели результирующее взаимодействие между двумя молекулами есть сумма всех возможных взаимодействий между отдельными атомами. Из-за отсутствия сферической симметрии и в общем случае не центрального расположения фуллеренов в комплексе $C_{80}@C_{320}$ эта модель дает ненулевой момент сил, что и определяет угловые колебания фуллеренов. Действие окружающей температуры моделировалось одномерным колебательным движением внешней оболочки рассматриваемого комплекса.

Таким образом, фуллерены комплекса находятся в полях сил, определяющих их взаимное влияние. В этом влиянии силовыми центрами являются позиции атомов. На рис. 1 представлен рассматриваемый комплекс; в узлах каркасной структуры показаны атомы углерода.

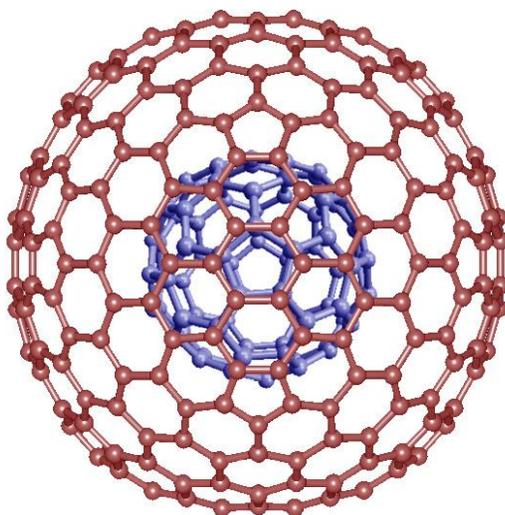


Рис. 1. Углеродный комплекс $C_{80}@C_{320}$

Fig. 1. Carbon complex $C_{80}@C_{320}$

Динамические уравнения Эйлера изначально представлены в проекциях на оси подвижной системы отсчета, связанной с отдельно взятым фуллереном. В то же время результирующее движение часто удобно представлять в абсолютной, неподвижной системе координат. В связи с этим силовые характеристики – проекции сил межатомного взаимодействия и их моменты – на первом этапе расчетов следует определять в абсолютном базисе. Далее с помощью матрицы поворота, имеющей компоненты в виде комбинаций тригонометрических функций от углов Эйлера, осуществляется переход к проекциям моментов сил в подвижном базисе. После этого данные проекции включаются в динамические уравнения Эйлера. Последние уравнения есть обыкновенные дифференциальные уравнения первого порядка относительно угловых скоростей вращающихся фуллеренов. Система таких уравнений будет замкнута, если включить в рассмотрение кинематические соотношения Эйлера, связывающие производные от углов Эйлера с проекциями

угловых скоростей и тригонометрическими функциями углов поворота. Дополняя все эти уравнения начальными данными, получим задачу Коши для определения углов Эйлера как функций времени.

В классической записи динамические уравнения Эйлера имеют вид:

$$A \frac{dp}{dt} + (C - B)qr = M_{\xi}, \quad (1)$$

$$B \frac{dq}{dt} + (A - C)pr = M_{\eta}, \quad (2)$$

$$C \frac{dr}{dt} + (B - A)pq = M_{\zeta}. \quad (3)$$

Здесь p, q, r – проекции угловой скорости на оси подвижной системы отсчета, A, B, C – главные моменты инерции молекулы для ее центра масс, $M_{\xi}, M_{\eta}, M_{\zeta}$ – моменты перекрестных атом-атомных взаимодействий.

Последние уравнения являются уравнениями вращательного движения молекулы вокруг ее центра масс. Эти уравнения замыкаются кинематическими соотношениями, связывающими проекции вектора мгновенной угловой скорости с углами Эйлера и их производными:

$$p = \dot{\psi} \sin \theta \sin \varphi + \dot{\theta} \cos \varphi, \quad (4)$$

$$q = \dot{\psi} \sin \theta \cos \varphi - \dot{\theta} \sin \varphi, \quad (5)$$

$$r = \dot{\psi} \cos \theta + \dot{\varphi}. \quad (6)$$

Используемые в дальнейшем начальные условия выглядят следующим образом:

$$t = 0: \psi = 0, \theta = \pi/2, \varphi = 0; p = p_0, q = 0, r = 0. \quad (7)$$

Выписанные условия замыкают постановку задачи о вращательном движении фуллеренов рассматриваемого комплекса. Поступательные перемещения фуллеренов определяются векторными уравнениями перемещений их центров масс.

Все уравнения интегрировались численно с использованием схемы Рунге–Кутты высокого порядка точности. Постоянный шаг интегрирования составлял величину 10^{-8} нс. Точность расчетов оценивалась по результатам решения простейших задач о вращении фуллеренов, а также по выполнению закона сохранения полной механической энергии в системе. Более подробное математическое описание представлено в работе [22].

Результаты расчетов

Мы провели расчеты динамического состояния фуллеренового комплекса $C_{80}@C_{320}$ в условиях, отвечающих колебательной температуре $T = 300$ К. В дальнейшем индекс «1» будет относиться к инкапсулированному фуллерену, а индекс «2» – к фуллерену C_{320} . Температуру в системе, состоящей из рассматриваемых комплексов, можно смоделировать гармоническими колебаниями центра масс оболочки. Поэтому в расчетах было принято: $x_2(t) = a \sin \omega t$, $y_2 = 0$, $z_2 = 0$. Если при этом положить $a = 0.05$ нм, $\omega = 10^3$ нс $^{-1}$, то внешняя оболочка будет участвовать в тепловом движении, отвечающем указанной выше средней температуре. Нас по-прежнему интересовал вопрос о возможности аккумуляции энергии на внутренних степенях свободы. Поэтому были проведены расчеты для двух

различных групп начальных условий: $t = 0$, $\frac{P_1}{2\pi} = 20 \text{ нс}^{-1}$, $\frac{Q_1}{2\pi} = 0$, $\frac{r_1}{2\pi} = 0$ и $t = 0$,

$\frac{P_1}{2\pi} = 200 \text{ нс}^{-1}$, $\frac{Q_1}{2\pi} = 0$, $\frac{r_1}{2\pi} = 0$, – обеспечивающих различные вращения внутреннего фуллера.

Данные, отвечающие умеренному начальному вращению инкапсулированного фуллера, приведены на рис. 2–8, данные для $\frac{P_1}{2\pi} = 200 \text{ нс}^{-1}$ – на рис. 9–15.

На рис. 2 показаны колебания центра масс инкапсулированного фуллера, индуцированные гармоническими колебаниями оболочки вдоль оси x . Видно, что наряду с x -колебаниями (черная линия) генерируются квазигармонические колебания небольшой амплитуды по двум другим ортогональным осям (красная и зеленая линии). Абсолютные значения скоростей центральных точек фуллеренов показаны на рис. 3. Поскольку исходные колебания гармонические и представлены абсолютные значения, то кривая, определяющая движение центра масс оболочки, выглядит как $|\sin t|$ (красная линия). Индуцированные этим движением скорости меньшего фуллера имеют в среднем несколько большие значения в сравнении со скоростью центра масс оболочки (черная линия). Зависимости углов Эйлера первого фуллера от времени имеют колебательный характер. Однако $\theta_1(t)$ показывает со временем монотонный рост. На рис. 4 θ – зеленая линия, ψ – красная линия, ϕ – черная линия. При заданном уровне вращения внутреннего фуллера ($\frac{P_1}{2\pi} = 20 \text{ нс}^{-1}$) и гармонических колебаниях положения оболочки вращающийся внутренний фуллерен вовлекает в такое же вращение оболочку (распределения θ на рис. 4, 5). На рис. 6 показаны распределения мгновенных значений угловых скоростей фуллеренов, составляющих рассматриваемый комплекс. Представленные скорости определяются через проекции по формуле

$$\omega = \sqrt{p^2 + q^2 + r^2}.$$

При этом сами проекции p (черная линия), q (красная линия), r (зеленая линия) показаны на рис. 7, 8. Из этого следует, что амплитуда колебаний всех проекций имеет одну частоту, но амплитуда угловых колебаний оболочки на порядок меньше соответствующих колебаний для инкапсулированного фуллера.

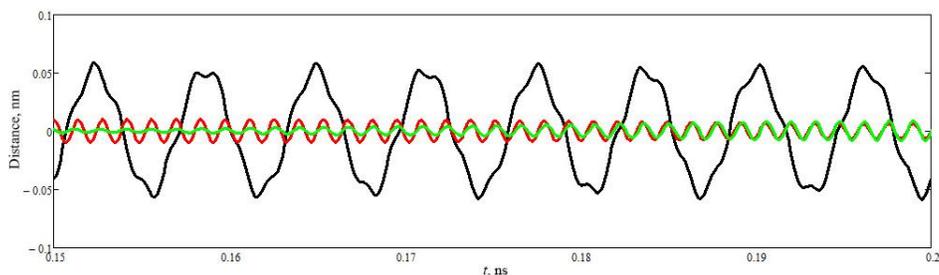


Рис. 2. Координаты центра масс C_{80}
 Fig. 2. Coordinates of the center of mass of C_{80}

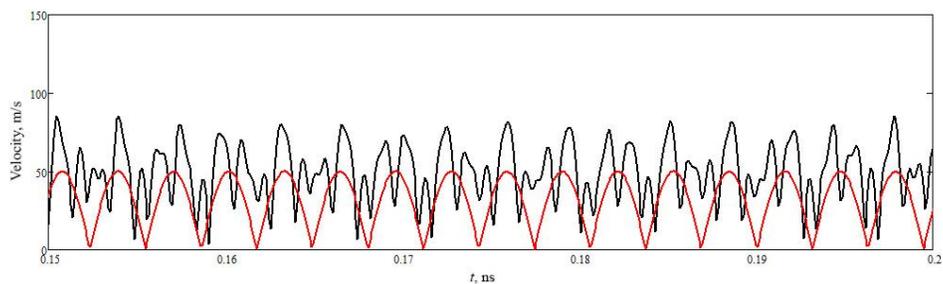


Рис. 3. Величины поступательных скоростей C_{80} и C_{320}
Fig. 3. Magnitude of a translational velocity of C_{80} and C_{320}

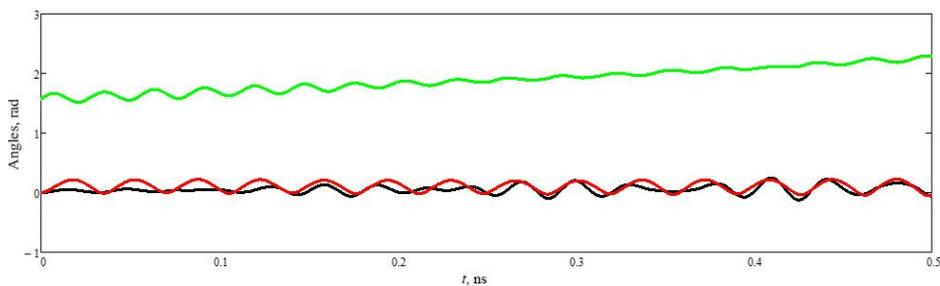


Рис. 4. Углы Эйлера C_{80}
Fig. 4. Euler angles of C_{80}

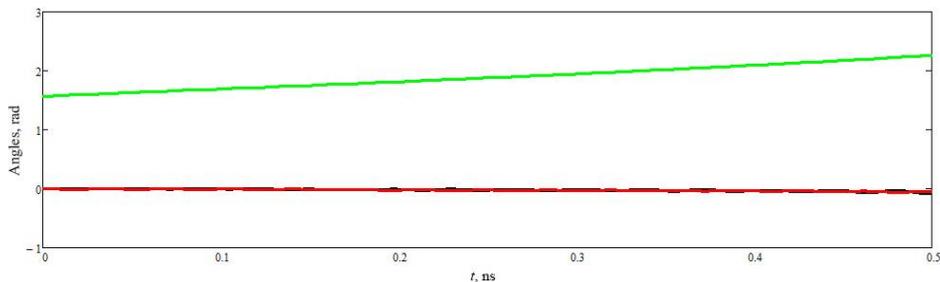


Рис. 5. Углы Эйлера C_{320}
Fig. 5. Euler angles of C_{320}

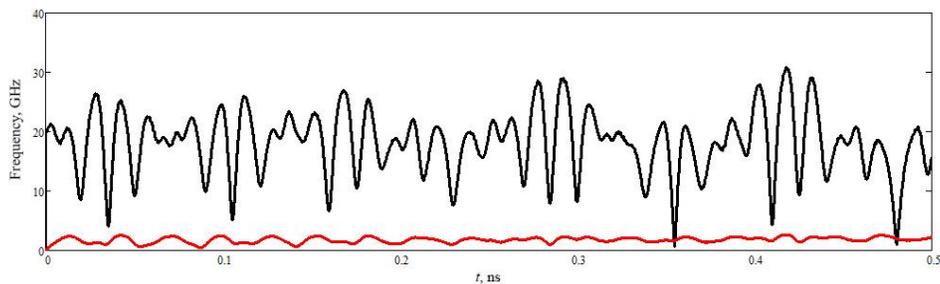


Рис. 6. Полные частоты вращения фуллеренов
Fig. 6. Total rotational frequencies of fullerenes

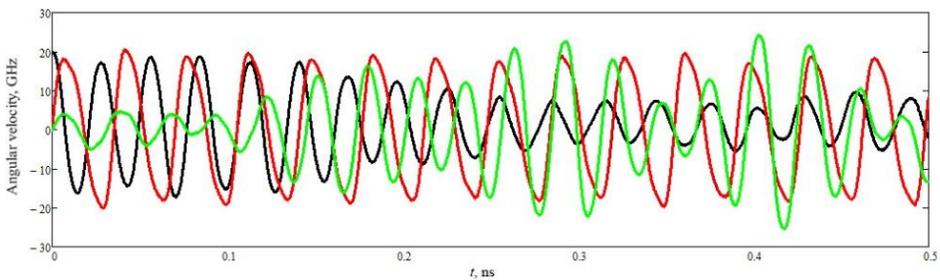


Рис. 7. Компоненты угловой скорости C_{80}
Fig. 7. Components of an angular velocity of C_{80}

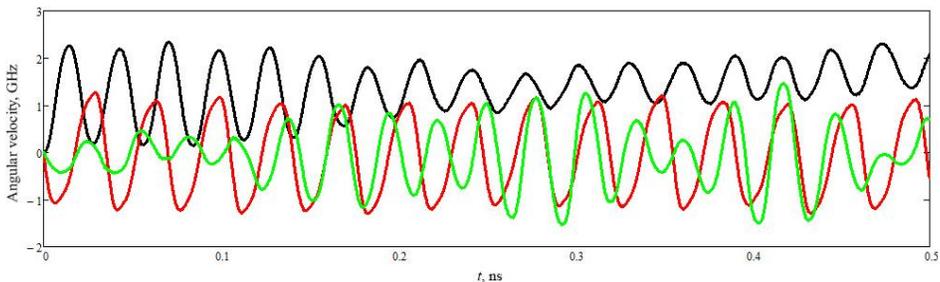


Рис. 8. Проекция частоты вращения C_{320}
Fig. 8. Projections of a rotational frequency of C_{320}

Теперь рассмотрим случай интенсивного начального вращения инкапсулированного фуллерена. Рисунки 9–15 отвечают случаю: $t = 0$, $p_1 = 200$ ГГц, $q_1 = 0$, $r_1 = 0$. Цвета на этих рисунках такие же, как и на рис. 2–8. Внешняя оболочка по-прежнему участвует в поступательных перемещениях по гармоническому закону. Сравнивая рис. 9–10 с рис. 2–3 видим, что поступательная динамика внутреннего фуллерена осталась прежней. Понятно, что в этом случае изменения будут связаны с вращательной динамикой. Как видно из рис. 11, угол нутации инкапсулированного фуллерена меняется от нуля до π с четко выраженной частотой. При этом наблюдаются повороты на угол π вокруг двух других главных осей. Изменения углов ψ и θ на угол π означают переворот фуллерена в пространстве. Поскольку C_{80} имеет близкие, но все же различные моменты инерции относительно своих главных осей, то отмеченный переворот есть проявление эффекта Джанибекова для атомизированного тела. Эффект Джанибекова рассмотрен в [25]. Значительные изменения углов ϕ и ψ со временем определяют результирующий поворот вокруг соответствующих осей. Как видно из рис. 12, внешний фуллерен не имеет кувырков. Для него изменение углов Эйлера происходит плавно, причем на величину, не превосходящую π . Рисунок 13 определяет абсолютные величины мгновенных угловых скоростей фуллеренов. Видно, что их средние значения составляют величины порядка нескольких процентов от своих начальных значений. Таким образом, кинетическая энергия раскрученного фуллерена практически не меняется. Однако имеет место перераспределение энергии вращений по угловым степеням свободы (см. рис. 14). Рисунок 15 также демонстрирует такое перераспределение, однако величина частот вращения для C_{320} не превосходит 2.5% начальной частоты C_{80} .

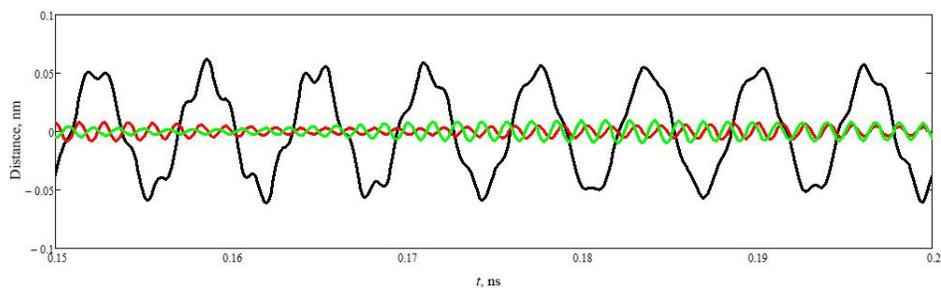


Рис. 9. Координаты центра масс внутреннего фуллерена
Fig. 9. Coordinates of the center of mass of the inner fullerene

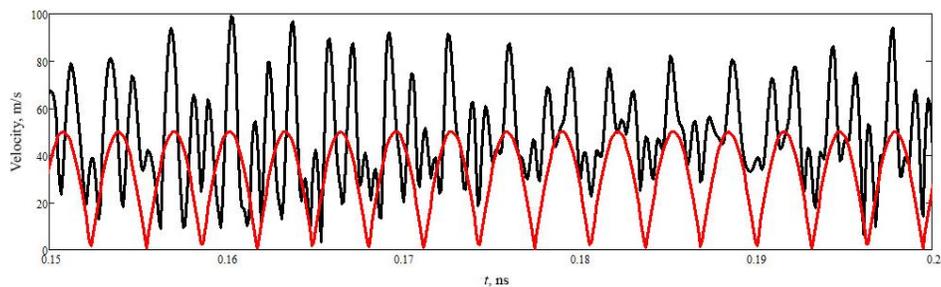


Рис. 10. Величины поступательных скоростей оболочки и внутреннего фуллерена
Fig. 10. Magnitude of translational velocities of the shell and inner fullerene

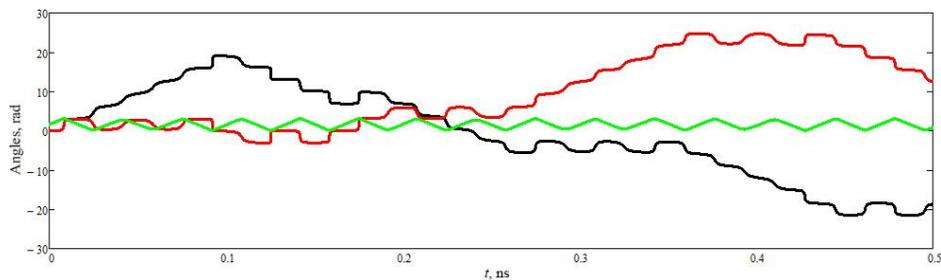


Рис. 11. Углы Эйлера инкапсулированного фуллерена
Fig. 11. Euler angles of the encapsulated fullerene

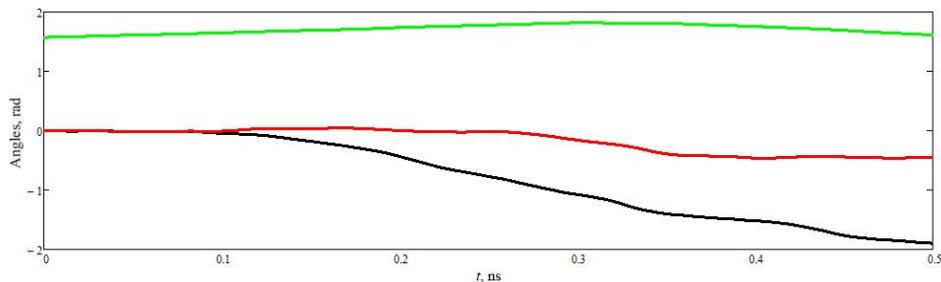


Рис. 12. Углы Эйлера оболочки фуллеренового комплекса $C_{80}@C_{320}$
Fig. 12. Euler angles of a shell of the fullerene complex $C_{80}@C_{320}$

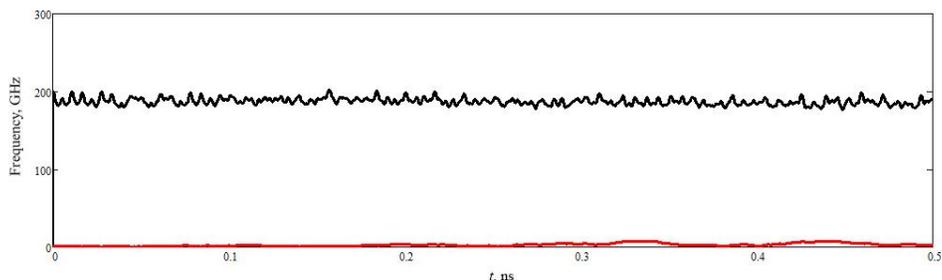


Рис. 13. Величины вращательных скоростей каждого из фуллеренов
Fig. 13. Magnitude of a rotational frequency of each of the fullerenes

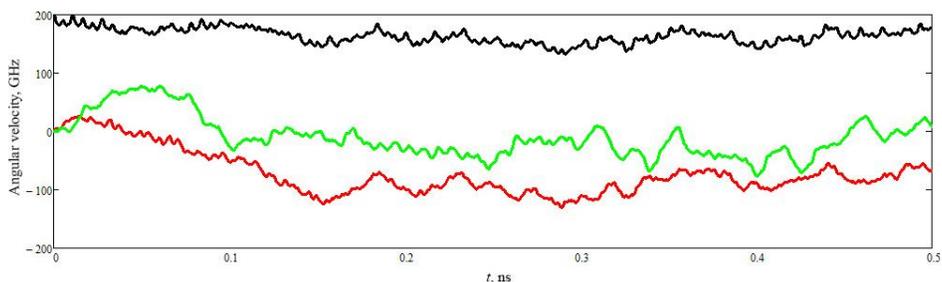


Рис. 14. Проекция частот вращения на главные подвижные оси внутреннего фуллерена
Fig. 14. Projections of a rotational frequency on the main moving axes of the inner fullerene

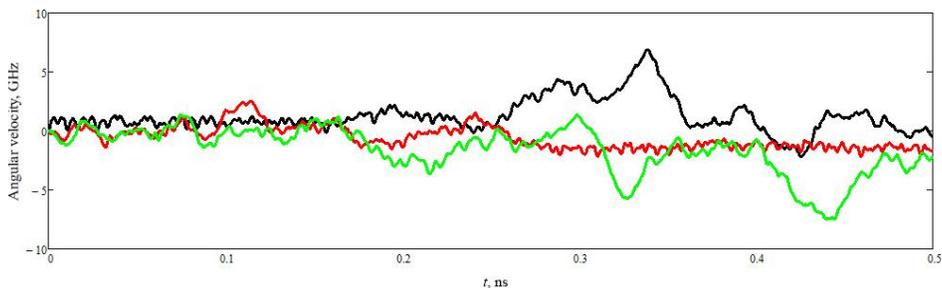


Рис. 15. Проекция частоты вращения на главные оси для оболочки фуллеренового комплекса
Fig. 15. Projections of a rotational frequency on the principal axes for a shell of the fullerene complex

Данные вычислений демонстрируют, что C_{80} можно раскручивать до тех пор, пока центробежная сила не разрушит его каркасную структуру.

Заключение

В представленной вычислительной работе проведена оценка влияния тепловых колебаний на способность инкапсулированного фуллерена сохранять вращательное движение в фуллереновом комплексе $C_{80}@C_{320}$. Расчетами показано, что чем выше начальная угловая скорость внутреннего фуллерена, тем более выраженной является указанная способность. В результате сыпучая среда, составлен-

ная рассматриваемыми фуллереновыми комплексами, будет иметь возможность накапливать значительное количество энергии на внутренних вращательных степенях свободы. Если при этом C_{80} будет интеркалирован железом, то система бифуллереновых частиц будет обладать выраженными магнитными свойствами.

Список источников

1. *Whitener E.K.J.* Theoretical Studies of CH₄ Inside an Open-Cage Fullerene: Translation–Rotation Coupling and Thermodynamic Effects // *J. Phys. Chem.* 2010. V. 114 (45). P. 12075–12082. doi: 10.1021/jp104601g
2. *Whitener E.K.J., Cross R.J., Saunders M., Iwamatsu Sho-ichi, Murata S., Nagase S.* Methane in open-cage [60]fullene // *Journal of the American Chemical Society.* 2009. V. 131 (18). P. 6338–6339. doi: 10.1021/ja901383r
3. *Huang T., Zhao J., Feng M., Dunsch L. et al.* A multi-state single-molecule switch actuated by rotation of an encapsulated cluster within a fullerene cage // *Chemical Physics Letters.* 2012. V. 552 (12). P. 1–12. doi: 10.1016/j.cplett.2012.09.064
4. *Lima R.F., Brandao J., Marcio M., Moraes F.* Effects of rotation in the energy spectrum of C₆₀ // *The European Physics Journal D.* 2014. V. 68 (94). doi: 10.1140/epjd/e2014-40570-4
5. *Konarev D.V., Lyubovskaya R.N., Khasanov S.S.* Transition from free rotation of C₇₀ molecules to static disorder in the molecular C₇₀ complex with covalently linked porphyrin dimers: {FeIII(PPP)2O}×C₇₀ // *Journal of Porphyrins and Phthalocyanines.* 2010. V. 14 (4). P. 293–297. doi: 10.1142/S1088424610002112
6. *Warner J.H., Ito Y., Zaka M., Ge L., Akachi T., Okimoto H., Porfyrakis K., Watt A.A.R., Shinohara H., Briggs G.A.D.* Rotating Fullerene Chains in Carbon Nanopeapods // *Nano Letters.* 2008. V. 8 (8). P. 2328–2335. doi: 10.1021/nl801149z
7. *Glukhova O.E., Zhdanov A.I., Rezkov A.G.* Rotation of the inner shell in a C₂₀@C₈₀ nanoparticle // *Physics of the Solid State.* 2005. V. 47 (2). P. 390–396. doi: 10.1134/1.1866425
8. *Glukhova O.E.* Theoretical study of the structure of the C₆₀@C₄₅₀ nanoparticle and relative motion of the encapsulated C₆₀ molecule // *J. Struct. Chem.* 2007. V. 48. P. S141–S146. doi: 10.1007/s10947-007-0157-y
9. *Dunn J.L., Hands I.D., Bates C.A.* Pseudorotation in fullerene anions // *Journal of Molecular Structure.* 2006. V. 838 (1–3). P. 60–65. doi: 10.1016/j.molstruc.2006.12.066
10. *Yang S., Wey T. et al.* Chlorination-Promoted Skeletal-Cage Transformations of C₈₈ Fullerene by C₂ Losses and a C–C Bond Rotation // *Chemistry.* 2015. V. 21 (43). P. 15138–15141. doi: 10.1002/chem.201501549
11. *MacKenzie R.C.I., Frost J.M., Nelson J.* A numerical study of mobility in thin films of fullerene derivatives // *Phys. Chem.* 2010. V. 132. Art. 064904. doi: 10.1063/1.3315872
12. *Herman R.M., Lewis J.C.* Vibration–rotation–translation spectrum of molecular hydrogen in fullerite lattices around 80 K // *Physica B: Condensed Matter.* 2009. V. 404 (8–11). P. 1581–1584. doi: 10.1016/j.physb.2009.01.029
13. *Lynden-Bell R.M., Michael K.H.* Translation-rotation coupling, phase transitions, and elastic phenomena in orientationally disordered crystals // *Reviews of Modern Physics.* 1994. V. 66 (3). Art. 721. doi: 10.1103/RevModPhys.66.721
14. *Griadun V.I.* Vacancies in nanotubes and fullerenes // *Proceedings of the 16th International Crimean Microwave and Telecommunication Technology, Sevastopol, 11–15 September, 2006. IEEE.* 2006. P. 669–670. doi: 10.1109/CRMICO.2006.256150
15. *Jaron-Becker A., Becker A., Faisal F.H.M.* Saturated Ionization of Fullerenes in Intense Laser Fields // *Phys. Rev. Letters.* 2006. V. 96. Art. 143006. doi: 10.1103/PhysRevLett.96.143006
16. *Slanina Z., Zhao X.* Model narrow nanotubes related to C₃₆, C₃₂ and C₂₀: Initial computational structural sampling // *Materials Science and Engineering B.* 2002. V. 96 (2). P. 164–168. doi: 10.1016/S0921-5107(02)00312-4

17. Bousige C., Verberck B. et al. Lattice dynamics of a rotor-stator molecular crystals: Fullerene-cubane C₆₀ C₈H₈ // *Phys. Rev. B*. 2010. V. 82 (19). Art. 195413. doi: 10.1103/PhysRevB.82.195413
18. Hosseini-Hashemi S., Sepahi-Boroujeni A., Sepahi-Boroujeni S. Analytical and molecular dynamics studies on the impact loading of single-layered graphene sheet by fullerene // *Applied Surface Science*. 2018. V. 437. P. 366–374. doi: 10.1016/j.apsusc.2017.12.141
19. Yang L., Chen J., Dong J. Stability of single-wall carbon nanotube tori // *Physica Status Solidi (B)*. 2004. V. 241 (6). P. 1269–1273. doi: 10.1002/pssb.200301998
20. Ruiz A., Hernández-Rojas J., Bretón J., Gomez Llorente J.M. Low-temperature dynamics and spectroscopy in exohedral rare-gas C₆₀ fullerene complexes // *J. Phys. Chem.* 2001. V. 114. doi: 10.1063/1.1350918
21. Bozhko S.I., Levchenko E.A., Semenov V.N., Bulatov M.F., Shvets I.V. Rotation dynamics of C₆₀ molecules in a monolayer fullerene film on the WO₂/W(110) surface near the rotational phase transition // *Journal of Experimental and Theoretical Physics*. 2015. V. 120 (5). P. 831–837. doi: 10.1134/S1063776115040032
22. Bubenchikov A.M., Bubenchikov M.A., Mamontov D.V., Lun-Fu A.V. MD-simulation of fullerene rotations in molecular crystall fullerite // *Crystals*. 2019. V. 9 (10). Art. 496. doi: 10.3390/cryst9100496
23. Bubenchikov A.M., Bubenchikov M.A., Mamontov D.V., Kaparulin D.S., Lun-Fu A.V. Dynamic state of columnar structures formed on the basis of carbon nanotori // *Fullerenes, Nanotubes and Carbon Nanostructures*. 2021. V. 29 (10). P. 825–831. doi: 10.1080/1536383X.2021.1908268
24. Bubenchikov A.M., Bubenchikov M.A., Mamontov D.V. The dynamic state of a pseudo-crystalline structure of B42 molecules // *Crystals*. 2020. Vol. 10 (6). Art. 510. doi: 10.3390/cryst10060510
25. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Теоретическая физика : в 10 т. М. : Наука, 1988. Т. 1: Механика. 216 с.

References

1. Whitener E.K.J. (2010) Theoretical studies of CH₄ inside an open-cage fullerene: translation-rotation coupling and thermodynamic effects. *The Journal of Physical Chemistry*. 114(45). pp. 12075–12082. doi: 10.1021/jp104601g
2. Whitener E.K.J., Cross R.J., Saunders M., Iwamatsu S-I., Murata S., Nagase S. (2009) Methane in open-cage [60]fullerene. *Journal of the American Chemical Society*. 131(18). pp. 6338–6339. doi: 10.1021/ja901383r
3. Huang T., Zhao J., Feng M., Popov A.A., Yang Sh., Dunsch L., Petek H. (2012) A multi-state single-molecule switch actuated by rotation of an encapsulated cluster within a fullerene cage. *Chemical Physics Letters*. 552(12). pp. 1–12. doi: 10.1016/j.cplett.2012.09.064
4. Lima R.F., Brandao J., Marcio M., Moraes F. (2014) Effects of rotation in the energy spectrum of C₆₀. *The European Physics Journal D*. 68(94). doi: 10.1140/epjd/e2014-40570-4
5. Konarev D.V., Lyubovskaya R.N., Khasanov S.S. (2010) Transition from free rotation of C₇₀ molecules to static disorder in the molecular C₇₀ complex with covalently linked porphyrin dimers: {(Fe^{III}TPP)₂O} × C₇₀. *Journal of Porphyrins and Phthalocyanines*. 14(4). pp. 293–297. doi: 10.1142/S1088424610002112
6. Warner J.H., Ito Y., Zaka M., Ge L., Akachi T., Okimoto H., Porfyrakis K., Watt A.A.R., Shinohara H., Briggs G.A.D. (2008) Rotating fullerene chains in carbon nanopeapods. *Nano Letters*. 8(8). pp. 2328–2335. doi: 10.1021/nl801149z
7. Glukhova O.E., Zhbanov A.I., Rezkov A.G. (2005) Rotation of the inner shell in a C₂₀@C₈₀ nanoparticle. *Physics of the Solid State*. 47(2). pp. 390–396. doi: 10.1134/1.1866425
8. Glukhova O.E. (2007) Theoretical study of the structure of the C₆₀@C₄₅₀ nanoparticle and relative motion of the encapsulated C₆₀ molecule. *Journal of Structural Chemistry*. 48(1). pp. S141–S146. doi: 10.1007/s10947-007-0157-y

9. Dunn J.L., Hands I.D., Bates C.A. (2007) Pseudorotation in fullerene anions. *Journal of Molecular Structure*. 838(1–3). pp. 60–65. doi: 10.1016/j.molstruc.2006.12.066
10. Yangs Sh., Wey T., Scheurell K., Kemnitz E., Troyanov S.I. (2015) Chlorination-promoted skeletal-cage transformations of C₈₈ fullerene by C₂ losses and a C–C bond rotation. *Chemistry – A European Journal*. 21(43). pp. 15138–15141. doi: 10.1002/chem.201501549
11. MacKenzie R.C.I., Frost J.M., Nelson J. (2010) A numerical study of mobility in thin films of fullerene derivatives. *The Journal of Chemical Physics*. 132(064904). doi: 10.1063/1.3315872
12. Herman R.M., Lewis J.C. (2009) Vibration–rotation–translation spectrum of molecular hydrogen in fullerite lattices around 80 K. *Physica B: Condensed Matter*. 404(8–11). pp. 1581–1584. doi: 10.1016/j.physb.2009.01.029
13. Lynden-Bell R.M., Michel K.H. (1994) Translation-rotation coupling, phase transitions, and elastic phenomena in orientationally disordered crystals. *Reviews of Modern Physics*. 66(3). Article 721. doi: 10.1103/RevModPhys.66.721
14. Griadun V.I. (2006) Vacancies in nanotubes and fullerenes. *Proceedings of the 16th International Crimean Microwave and Telecommunication Technology, Sevastopol, 11–15 September, 2006. IEEE*. pp. 669–670. doi: 10.1109/CRMICO.2006.256150
15. Jaron-Becker A., Becker A., Faisal F.H.M. (2006) Saturated ionization of fullerenes in intense laser fields. *Physical Review Letters*. 96(14). Article 143006. doi: 10.1103/PhysRevLett.96.143006
16. Slanina Z., Zhao X. (2002) Model narrow nanotubes related to C₃₆, C₃₂ and C₂₀: initial computational structural sampling. *Materials Science and Engineering B*. 96(2). pp. 164–168. doi: 10.1016/S0921-5107(02)00312-4
17. Bousige C., Rols S., Cambedouzou J., Verberck B., Pekker S., Kovats E., Durko G., Jalsovsky I., Pellegrini E., Launois P. (2010) Lattice dynamics of a rotor-stator molecular crystals: Fullerene-cubane C₆₀:C₈H₈. *Physical Review B*. 82(19). Article 195413. doi: 10.1103/PhysRevB.82.195413
18. Hosseini-Hashemi Sh., Sepahi-Boroujeni A., Sepahi-Boroujeni S. (2018) Analytical and molecular dynamics studies on the impact loading of single-layered graphene sheet by fullerene. *Applied Surface Science*. 437. pp. 366–374. doi: 10.1016/j.apsusc.2017.12.141
19. Yang L., Chen J., Dong J. (2004) Stability of single-wall carbon nanotube tori. *Physica Status Solidi (b)*. 241(6). pp. 1269–1273. doi: 10.1002/pssb.200301998
20. Ruiz A., Hernandez-Rojas J., Breton J., Gomez Llorente J.M. (2001) Low-temperature dynamics and spectroscopy in exohedral rare-gas C₆₀ fullerene complexes. *The Journal of Physical Chemistry*. 114(12). Article 5156. doi: 10.1063/1.1350918
21. Bozhko S.I., Levchenko E.A., Semenov V.N., Bulatov M.F., Shvets I.V. (2015) Rotation dynamics of C₆₀ molecules in a monolayer fullerene film on the WO₂/W(110) surface near the rotational phase transition. *Journal of Experimental and Theoretical Physics*. 120(5). pp. 831–837. doi: 10.1134/S1063776115040032
22. Bubenchikov A.M., Bubenchikov M.A., Mamontov D.V., Lun-Fu A.V. (2019) MD-simulation of fullerene rotations in molecular crystall fullerite. *Crystals*. 9(10). Article 496. doi: 10.3390/cryst9100496
23. Bubenchikov A.M., Bubenchikov M.A., Mamontov D.V., Kaparulin D.S., Lun-Fu A.V. (2021) Dynamic state of columnar structures formed on the basis of carbon nanotori. *Fullerenes, Nanotubes and Carbon Nanostructures*. 29(10) pp. 825–831. doi: 10.1080/1536383X.2021.1908268
24. Bubenchikov A.M., Bubenchikov M.A., Mamontov D.V. (2020) The dynamic state of a pseudo-crystalline structure of B₄₂ molecules. *Crystals*. 10(6). Article 510. doi: 10.3390/cryst10060510
25. Landau L.D., Lifshitz E.M. (1982) *Course of Theoretical Physics, Vol. 1: Mechanics, 3rd Edition*. Oxford: Butterworth-Heinemann.

Сведения об авторах:

Бубенчиков Михаил Алексеевич – доктор физико-математических наук, доцент кафедры теоретической механики Томского государственного университета, Томск, Россия. E-mail: michael121@mail.ru

Мамонтов Дмитрий Владимирович – младший научный сотрудник регионального научно-образовательного математического центра Томского государственного университета, Томск, Россия. E-mail: orevaore@mail.ru

Челнокова Анна Сергеевна – старший преподаватель кафедры теоретической механики Томского государственного университета, Томск, Россия. E-mail: smolina-nyuta@mail.ru

Information about the authors:

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

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

Chelnokova Anna S. (Tomsk State University, Tomsk, Russian Federation). E-mail: smolina-nyuta@mail.ru

Статья поступила в редакцию 09.11.2021; принята к публикации 19.05.2022

The article was submitted 09.11.2021; accepted for publication 19.05.2022