

Научная статья

УДК 531.352

doi: 10.17223/19988621/80/5

Вращение супермолекул вокруг промежуточной оси инерции

Михаил Алексеевич Бубенчиков¹, Дмитрий Владимирович Мамонтов²,
Сергей Андреевич Ажеев³, Александр Андреевич Ажеев⁴

^{1, 2, 3, 4} Томский государственный университет, Томск, Россия

¹ michael121@mail.ru

² orevaore@mail.ru

³ sazheev72@yandex.ru

⁴ sazheev@gmail.com

Аннотация. Предложена вычислительная схема численного интегрирования уравнений инерционного вращения высокомолекулярных углеродных конструкций неизменной формы. Рассмотрено вращение супермолекулы вокруг промежуточной оси инерции. Приведенные точные численные расчеты позволили построить полную картину развития неустойчивости, являющейся ничем иным как проявлением теоремы о промежуточной оси.

Ключевые слова: численное моделирование, молекулярная динамика, фуллерены

Благодарности: Исследование выполнено при финансовой поддержке гранта Министерства науки и высшего образования Российской Федерации № 075-02-2020-1479/1.

Для цитирования: Бубенчиков М.А., Мамонтов Д.В., Ажеев С.А., Ажеев А.А. Вращение супермолекул вокруг промежуточной оси инерции // Вестник Томского государственного университета. Математика и механика. 2022. № 80. С. 49–58. doi: 10.17223/19988621/80/5

Original article

Rotation of supermolecules around an intermediate axis of inertia

Mikhail A. Bubenchikov¹, Dmitriy V. Mamontov²,
Sergey A. Azheev³, Aleksandr A. Azheev⁴

^{1, 2, 3, 4} Tomsk State University, Tomsk, Russian Federation

¹ michael121@mail.ru

² orevaore@mail.ru

³ sazheev72@yandex.ru

⁴ sazheev@gmail.com

Abstract. In the problem of the inertial rotation of molecular objects, only kinematic relations for the nodes of the molecular structure are evolutionary. These relations determine the position of the atoms of a supermolecule depending on the instantaneous angular velocity

of the object in inertial motion. All other relations are algebraic, since they are integrals of the equations of rotational motion. The latter relations include both the projections of the angular velocities of the molecule and the instantaneous coordinates of the atoms. Within the framework of the fourth-order Runge-Kutta scheme, each time step is divided into four positions. Initially, in each of these positions, new values of coordinates are determined or the initial coordinates of atoms at the first position of the first time step are used. After the coordinates are found, in the same position, the projections of angular velocities of the supermolecule are obtained from conservation relations for the projections of the angular momentum. Based on the values of the coordinates in four positions, the coordinates on a new time layer are recalculated. After that, solving the system of three linear algebraic equations according to Cramer's rule, the projections of angular velocities at a new time step are determined. Then, the cycle is repeated. During the inertial rotation, the kinetic energy of an object is conserved. Verification of the calculated kinetic energy shows that the result is obtained with machine accuracy. Further, the constructed calculation scheme is used to study the Louis Poincaré instability. The full range of the considered instability for a fullerene C_{100} (C_1 symmetry) is presented.

Keywords: numerical modeling, molecular dynamics, fullerenes

Acknowledgments: This work was partially supported by the Ministry of Science and Higher Education of the Russian Federation (project No. 075-02-2020-1479/1).

For citation: Bubenchikov, M.A., Mamontov, D.V., Azheev, S.A., Azheev, A.A. (2022) Rotation of supermolecules around an intermediate axis of inertia. *Vestnik Tomskogo gosudarstvennogo universiteta. Matematika i mekhanika – Tomsk State University Journal of Mathematics and Mechanics*. 80. pp. 49–58. doi: 10.17223/19988621/80/5

Введение

Существует два основных подхода в описании вращательного движения тел, в частности супермолекул. Первый – подход Эйлера. В этом подходе уравнения теоремы о кинетическом моменте рассматриваются в подвижных осях, и вводятся в рассмотрение углы Эйлера (углы, определяющие взаимное расположение подвижного и неподвижного базисов). Причем углы Эйлера находятся из так называемых кинематических соотношений Эйлера, которые имеют координатную особенность при значениях углов нутации, кратных π . Кроме того, подход Эйлера имеет такое свойство, как «блокировка осей», и результат будет зависеть от выбора порядка осей, вокруг которых осуществляются повороты. Общий случай этого подхода описан в [1]. В работах [2–5] представлены примеры применения этого подхода в молекулярной динамике. Второй способ описания вращательного движения можно назвать подходом Гамильтона [6]. Он опирается на использование гиперкомплексных чисел в четырехмерном пространстве, т.е. кватернионов. Эти числа позволяют проще комбинировать вращения и избежать проблем с особенностями представления поворотов в пространстве. Однако при практической реализации требуется использование в вычислительных системах встроеной алгебры гиперкомплексных чисел. Кроме того, кватернионы могут становиться недействительными из-за ошибки округления чисел с плавающей запятой (эту «вкравшуюся ошибку» можно устранить ренормализацией кватерниона). Еще одним препятствием для применения кватернионов может быть высокая сложность их понимания. В работах [7–11] кватернионы использовались в расчетах

молекулярной динамики. В настоящей работе представлен способ расчета вращения супермолекул без использования кватернионов и углов Эйлера.

Вполне сформировавшейся к настоящему времени является проблема расчета инерциального вращения объектов с применением высокоточных алгоритмов, использующих идею пересчета на каждом шаге по времени. Надежный метод Рунге–Кутты разработан и применяется лишь для решения эволюционных задач. В рассматриваемой ситуации основное уравнение вращательного движения не имеет формы, содержащей производную по времени, поскольку записывается в виде алгебраических соотношений, определяющих постоянство проекций кинетического момента на оси абсолютного базиса. Эволюционными являются лишь кинематические соотношения для скоростей узлов супермолекулы. Эти уравнения мы интегрируем на каждой четвертой шага стандартного метода Рунге–Кутты четвертого порядка точности и находим новые значения координат узлов. В то же время в каждой промежуточной позиции отдельного шага по времени из решения алгебраической системы уравнений постоянства кинетического момента мы определяем новые проекции мгновенной угловой скорости супермолекулы. После этого по новым значениям проекций скорости поворота и координат узлов находятся значения величин на полном шаге по времени.

Математическое описание вращательной динамики супермолекулы

Рассмотрим уравнение для кинетического момента $\mathbf{K}$ в абсолютном базисе. Согласно теореме об изменении момента количества движения для неизменяемого тела

$$\frac{d\mathbf{K}}{dt} = \mathbf{L}^{(e)}. \quad (1)$$

Здесь $\mathbf{L}^{(e)}$ – главный момент внешних сил. В задачах об инерционном движении супермолекул $\mathbf{L}^{(e)} = 0$.

По определению

$$\mathbf{K} = \sum \mathbf{r}_i \times m\mathbf{v}_i, \quad (2)$$

где $\mathbf{r}_i$ – радиус точки тела (в углеродных супермолекулах это радиус атома углерода), $\mathbf{v}_i$ – скорость этой точки, m – масса атома углерода. Если супермолекула вращается с угловой скоростью $\boldsymbol{\omega}$, то скорость ее отдельной точки будет определена следующим соотношением:

$$\mathbf{v}_i = \boldsymbol{\omega} \times \mathbf{r}_i. \quad (3)$$

Раскрывая векторное произведение, можно записать:

$$\boldsymbol{\omega} \times \mathbf{r}_i = \begin{vmatrix} \mathbf{i} & \mathbf{j} & \mathbf{k} \\ \omega_x & \omega_y & \omega_z \\ x_i & y_i & z_i \end{vmatrix} = \mathbf{i}(\omega_y z_i - \omega_z y_i) + \mathbf{j}(\omega_z x_i - \omega_x z_i) + \mathbf{k}(\omega_x y_i - \omega_y x_i).$$

Здесь использовано, что вектор угловой скорости и радиус-вектор атома углерода в углеродной конструкции имеют следующие проекции на оси абсолютного базиса:

$$\boldsymbol{\omega} = (\omega_x, \omega_y, \omega_z), \quad \mathbf{r}_i = (x_i, y_i, z_i).$$

Если подставить (3) в (2), то кинетический момент $\mathbf{K}$ будет определяться двойным векторным произведением векторов $\mathbf{r}_i$, $\boldsymbol{\omega}_i$, $\mathbf{r}_i$. Раскрывая это произве-

дение по известной формуле и заменяя скалярные произведения через координаты, получим

$$\mathbf{K} = m \left[\boldsymbol{\omega} \sum (x_i^2 + y_i^2 + z_i^2) - \sum \mathbf{r}_i (\omega_x x_i + \omega_y y_i + \omega_z z_i) \right]. \quad (4)$$

Проецируя полученное выражение на неподвижные оси, найдем

$$K_x = m \left[\omega_x \sum (y_i^2 + z_i^2) - \omega_y \sum x_i y_i - \omega_z \sum z_i x_i \right], \quad (5)$$

$$K_y = m \left[-\omega_x \sum x_i y_i + \omega_y \sum (z_i^2 + x_i^2) - \omega_z \sum y_i z_i \right], \quad (6)$$

$$K_z = m \left[-\omega_x \sum z_i x_i - \omega_y \sum y_i z_i + \omega_z \sum (x_i^2 + y_i^2) \right]. \quad (7)$$

Тогда более компактно можно записать:

$$K_x = A\omega_x + F\omega_y + E\omega_z, \quad (8)$$

$$K_y = F\omega_x + B\omega_y + D\omega_z, \quad (9)$$

$$K_z = E\omega_x + D\omega_y + C\omega_z. \quad (10)$$

Здесь A, B, C, D, E, F – компоненты симметричного тензора инерции супермолекулы, которые определяются следующими формулами:

$$A = m \sum (y_i^2 + z_i^2), B = m \sum (z_i^2 + x_i^2), C = m \sum (x_i^2 + y_i^2), \quad (11)$$

$$D = -m \sum y_i z_i, E = -m \sum z_i x_i, F = -m \sum x_i y_i. \quad (12)$$

Здесь x_i, y_i, z_i – координаты, для нахождения которых используются кинематические соотношения (19). Интегрируя (1), в случае инерционного движения $\mathbf{L}^{(e)} = 0$ получим:

$$K_x = K_x^0, K_y = K_y^0, K_z = K_z^0. \quad (13)$$

Здесь K_x^0, K_y^0, K_z^0 – проекции кинетического момента, отвечающие начальному моменту времени (константы). С учетом (8)–(10) последние соотношения можно переписать в виде:

$$A\omega_x + F\omega_y + E\omega_z = A^0\omega_x^0 + F^0\omega_y^0 + E^0\omega_z^0, \quad (14)$$

$$F\omega_x + B\omega_y + D\omega_z = F^0\omega_x^0 + B^0\omega_y^0 + D^0\omega_z^0, \quad (15)$$

$$E\omega_x + D\omega_y + C\omega_z = E^0\omega_x^0 + D^0\omega_y^0 + C^0\omega_z^0. \quad (16)$$

Индекс ‘ноль’ сверху определяет значения величин в начальный момент времени. Скорость каждого атома при вращении молекулы вокруг неподвижного центра масс определяется как скорость во вращательном движении:

$$\frac{d\mathbf{r}_i}{dt} = \boldsymbol{\omega} \times \mathbf{r}_i. \quad (17)$$

Последнее уравнение интегрируется при следующих начальных условиях:

$$t = 0, \mathbf{r}_i = \mathbf{r}_i^0 \quad (i = \overline{1, N}). \quad (18)$$

Здесь $\mathbf{r}_i^0$ определяют начальные положения узлов рассматриваемой молекулярной конструкции, N – количество атомов в супермолекуле. Постановка (14)–(18) вместе с замыкающими соотношениями (11)–(12) определяет все инерционные вращения супермолекул, в частности неустойчивое движение вокруг промежуточной оси инерции.

В дальнейшем индекс ‘ i ’ у координат радиус-вектора будем опускать.

Векторное уравнение (17) эквивалентно трем скалярным уравнениям:

$$\frac{dx}{dt} = \omega_y z - \omega_z y, \quad \frac{dy}{dt} = \omega_z x - \omega_x z, \quad \frac{dz}{dt} = \omega_x y - \omega_y x. \quad (19)$$

Эти уравнения и будем интегрировать в первую очередь, решая задачи об инерционном вращении крупных молекул. Уравнения (19) позволяют найти новое значение декартовых координат силовых центров молекулы (координат атомов) при ее повороте на элементарный угол ωdt . Однако в рамках каждого шага по времени мы выделяем четыре позиции по времени (схема четвертого порядка точности). Эти позиции будут отвечать индексам 1, 2, 3, 4 (внизу). Пусть x^n, y^n, z^n – декартовы координаты атомов молекулы на n -слое по времени; в частности, при $n = 0$ это начальные значения координат. Тогда в качестве координат для первой позиции мы, очевидно, должны взять

$$x_1 = x^n, y_1 = y^n, z_1 = z^n. \quad (20)$$

Уравнения (14)–(16) являются уравнениями инерциального вращения. Подставляя в эти уравнения координаты силовых центров (на самом деле $x_{i1}, y_{i1}, z_{i1}, i = 1, \dots, N$) и разрешая их относительно проекций угловых скоростей, находим $\omega_{x1}, \omega_{y1}, \omega_{z1}$. В результате мы можем вычислить правые части уравнений (18):

$$\xi_1 = \omega_{y1} z_1 - \omega_{z1} y_1, \quad \eta_1 = \omega_{z1} x_1 - \omega_{x1} z_1, \quad \zeta_1 = \omega_{x1} y_1 - \omega_{y1} x_1. \quad (21)$$

По формулам Рунге–Кутты четвертого порядка точности вычисляются значения координат во второй позиции шага по времени:

$$x_2 = x^n + \frac{\Delta t}{2} \xi_1, \quad y_2 = y^n + \frac{\Delta t}{2} \eta_1, \quad z_2 = z^n + \frac{\Delta t}{2} \zeta_1. \quad (22)$$

После этого из системы (14)–(16) находятся $\omega_{x2}, \omega_{y2}, \omega_{z2}$. Когда проекции угловой скорости во второй позиции найдены, можно вычислить ξ_2, η_2, ζ_2 :

$$\xi_2 = \omega_{y2} z_2 - \omega_{z2} y_2, \quad \eta_2 = \omega_{z2} x_2 - \omega_{x2} z_2, \quad \zeta_2 = \omega_{x2} y_2 - \omega_{y2} x_2. \quad (23)$$

Третья позиция по координатам определяется формулами

$$x_3 = x^n + \frac{\Delta t}{2} \xi_2, \quad y_3 = y^n + \frac{\Delta t}{2} \eta_2, \quad z_3 = z^n + \frac{\Delta t}{2} \zeta_2. \quad (24)$$

Далее из (14)–(16) находим $\omega_{x3}, \omega_{y3}, \omega_{z3}$ и вычисляем ξ_3, η_3, ζ_3 :

$$\xi_3 = \omega_{y3} z_3 - \omega_{z3} y_3, \quad \eta_3 = \omega_{z3} x_3 - \omega_{x3} z_3, \quad \zeta_3 = \omega_{x3} y_3 - \omega_{y3} x_3. \quad (25)$$

Тогда четвертая позиция по координатам будет следующей:

$$x_4 = x^n + \Delta t \xi_3, \quad y_4 = y^n + \Delta t \eta_3, \quad z_4 = z^n + \Delta t \zeta_3. \quad (26)$$

По значениям x_4, y_4, z_4 из (14)–(16) находим $\omega_{x4}, \omega_{y4}, \omega_{z4}$ и после этого

$$\xi_4 = \omega_{y4} z_4 - \omega_{z4} y_4, \quad \eta_4 = \omega_{z4} x_4 - \omega_{x4} z_4, \quad \zeta_4 = \omega_{x4} y_4 - \omega_{y4} x_4. \quad (27)$$

Теперь можно найти значения координат на следующем шаге по времени:

$$\begin{aligned} x^{n+1} &= x^n + \frac{\Delta t}{6} (\xi_1 + 2\xi_2 + 2\xi_3 + \xi_4); \\ y^{n+1} &= y^n + \frac{\Delta t}{6} (\eta_1 + 2\eta_2 + 2\eta_3 + \eta_4); \\ z^{n+1} &= z^n + \frac{\Delta t}{6} (\zeta_1 + 2\zeta_2 + 2\zeta_3 + \zeta_4). \end{aligned} \quad (28)$$

Значения проекций угловых скоростей на очередном шаге по времени ω_x^{n+1} , ω_y^{n+1} , ω_z^{n+1} также определяются из уравнений (14)–(16) после подстановки значений координат из (28).

Направляющие косинусы вектора ω :

$$\alpha = \frac{\omega_x}{\omega}, \quad \beta = \frac{\omega_y}{\omega}, \quad \gamma = \frac{\omega_z}{\omega}. \quad (29)$$

Здесь $\omega = \sqrt{\omega_x^2 + \omega_y^2 + \omega_z^2}$ – модуль вектора мгновенной угловой скорости.

Тогда момент инерции супермолекулы относительно мгновенной оси вращения будет

$$J = A\alpha^2 + B\beta^2 + C\gamma^2 + 2D\beta\gamma + 2E\gamma\alpha + 2F\alpha\beta. \quad (30)$$

Зная момент инерции, легко рассчитать мгновенное значение кинетической энергии:

$$T = J \frac{\omega^2}{2}. \quad (31)$$

Это значение должно оставаться постоянным во все время инерционного вращения около центра масс тела. Проверка закона сохранения кинетической энергии в инерционном движении может быть тестом, подтверждающим правильность выполненных расчетов. В процессе расчетов удобно отслеживать траекторию конца единичного вектора, имеющего координаты (29). В этом случае мы будем видеть только кувырки тела, а траектория участков постоянного вращения будет стянута в точку.

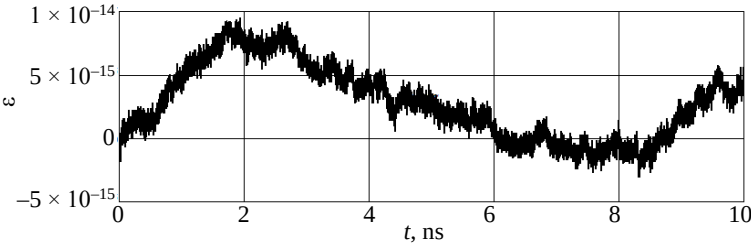


Рис. 1. Относительная погрешность вычислений

Fig. 1. Relative error in calculations

На рис. 1 представлен график относительной погрешности вычислений $\varepsilon = (T - T_0) / T_0$. Здесь T_0 – начальное значение энергии вращения объекта. Расчеты проведены при $\Delta t = 10^{-6}$ нс. Как видно, погрешность имеет порядок машинной точности. Таким образом, в рассматриваемом случае на промежутке времени, отвечающем нескольким кувыркам объекта, мы можем говорить о точном численном решении задачи.

Результаты расчетов

Описанная выше схема четвертого порядка точности относительно шага по времени позволяет получить блестящее соответствие расчетных значений с точными распределениями во всех тестовых задачах инерционного движения. Рассмотрим

теперь результаты расчета неустойчивого движения, инерционного вращения тела вокруг главной оси инерции, имеющей промежуточную величину момента инерции тела. В качестве супермолекулы мы использовали фуллерен C_{100} (C_1 симметрия), схематически представленный на рис. 2, 3.

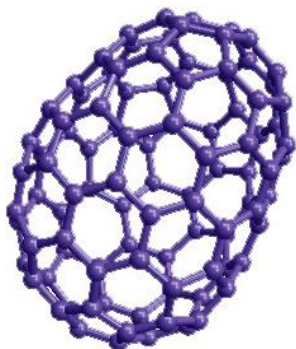


Рис. 2. Схематическое изображение фуллерена C_{100} (C_1)

Fig. 2. Schematic representation of a fullerene C_{100} (C_1)

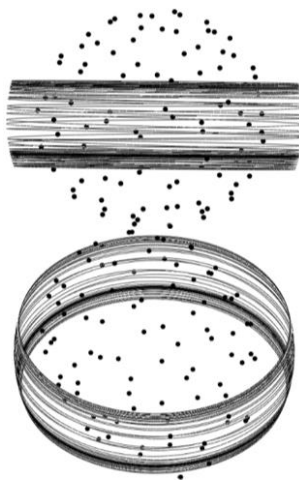


Рис. 3. Траектория одного из атомов углерода, принадлежащего фуллерену

Fig. 3. Trajectory of a carbon atom of the fullerene

Рис. 3 показывает, траекторию атома фуллерена во время вращения. На этом рисунке видны две наиболее жирно прорисованных окружности – это два положения вращения фуллерена. Данные окружности отвечают горизонтальным участкам частоты, показанной на рис. 4. Все остальные точки на рис. 3 являются переворотом фуллерена из-за неустойчивого вращения вокруг оси, имеющей промежуточный момент инерции.

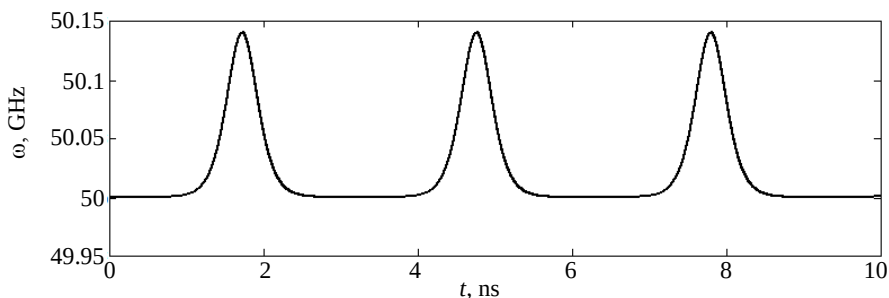


Рис. 4. Модуль вектора мгновенной частоты вращения

Fig. 4. Modulus of an instantaneous speed vector

На рис. 4., горизонтальные площадки отражают стабильное вращение фуллерена, в то время как пики – это перевороты фуллерена на 180° .

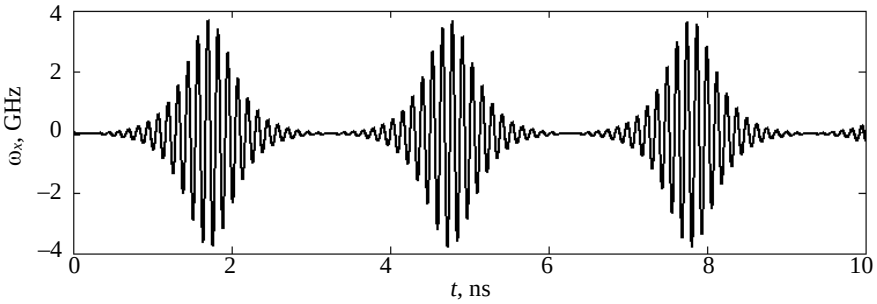


Рис. 5. Индуцированная x-компонента угловой скорости
Fig. 5. The induced x-component of the angular velocity

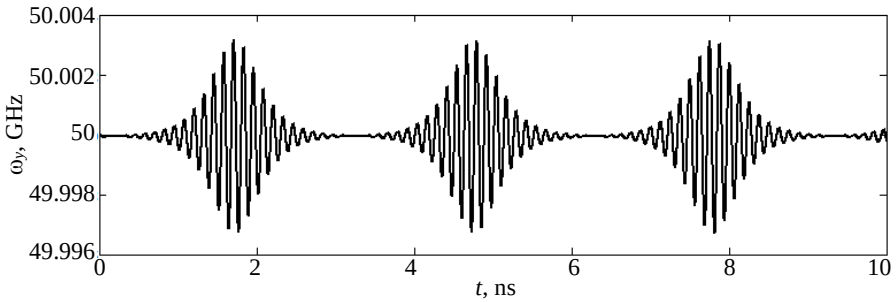


Рис. 6. Индуцированная y-компонента угловой скорости
Fig. 6. The induced y-component of the angular velocity

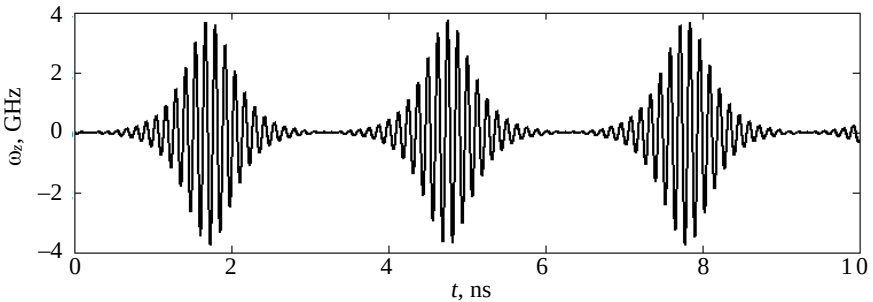


Рис. 7. Индуцированная z-компонента угловой скорости
Fig. 7. The induced z-component of the angular velocity

На рис. 3–7 мы имеем универсальный портрет неустойчивости вращения вокруг промежуточной оси инерции для фуллерена, вращающегося вокруг оси, имеющей промежуточный момент инерции.

Заключение

Математическая модель инерционного вращения супермолекул строится на основе теоремы о сохранении момента количества этих молекулярных конструкций и кинематических соотношений, определяющих координаты отдельных атомов. Несмотря на сохранение значений каждой из компонент кинетического момента,

изменение координат узлов молекулярной конструкции в случае вращения супермолекулы вокруг промежуточной оси инерции неизбежно приводит к изменению проекций ее угловых скоростей. В этом случае мгновенная ось вращения изменяет свое положение в пространстве. По траекториям, являющимся пересечением мгновенной оси вращения с единичной сферой, можно сделать заключение о характере рассматриваемой неустойчивости. Высокоточный алгоритм решения эволюционных задач был встроено в условия динамического равновесия рассматриваемой механической системы. Это позволило получить достоверный результат теоретического анализа.

Список источников

1. Goldstein H. Classical Mechanics. 2nd ed. USA: Addison–Wesley, 1980. 638 p.
2. Бубенчиков М.А., Бубенчиков А.М., Мамонтов Д.В. Вращения и вибрации торов в молекулярном комплексе $C_{20}@C_{80}$ // Вестник Томского государственного университета. Математика и механика. 2021. № 71. С. 35–48. doi: 10.17223/19988621/71/4
3. Бубенчиков М.А., Бубенчиков А.М., Мамонтов Д.В., Капарулин Д.С., Лун-Фу А.В. Вращение торов в структуре жидкого кристалла // Вестник Томского государственного университета. Математика и механика. 2021. № 73. С. 42–49. doi: 10.17223/19988621/73/4
4. 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. 1–7. doi: 10.1080/1536383X.2021.1908268
5. Lun-Fu A.V., Bubenchikov M.A., Bubenchikov A.M., Mamontov D.V., Borodin V.A. Interaction of molecular tori in columnar structures // Journal of Physics: Condensed Matter. 2021. V. 34 (12). doi: 10.1088/1361-648X/ac45b9
6. Hamilton R.W. On quaternions; or on a new system of imaginaries in Algebra // The London, Edinburgh, and Dublin Philosophical Magazine and Journal of Science. 1844. V. 25 (169). P. 489–495. doi: 10.1080/1478644408645047
7. Denis J.E., Sohail M. Singularity free algorithm for molecular dynamics simulation of rigid polyatomics // Molecular Physics. 1977. V. 34 (2). P. 327–331. doi: 10.1080/00268977700101761
8. Pawley G.S. Molecular dynamics simulation of the plastic phase; a model for SF_6 // Molecular Physics. 1981. V. 43 (6). P. 1321–1330. doi: 10.1080/00268978100102091
9. Karney Ch. Quaternions in molecular modeling // Journal of Molecular Graphics & Modelling. 2007. V. 25. P. 595–604. doi: 10.1016/j.jmglm.2006.04.002
10. Miller T.F. III, Eleftheriou M., Pattnaik P., Ndirango A., Newns D. Symplectic quaternion scheme for biophysical molecular dynamics // The Journal of Chemical Physics. 2002. V. 116 (20). P. 8649–8659. doi: 10.1063/1.1473654
11. Chen P.-c., Hologne M., Walker O. Computing the Rotational Diffusion of Biomolecules via Molecular Dynamics Simulation and Quaternion Orientations // The Journal of Physical Chemistry B. 2017. V. 121 (8). P. 1812–1823. doi: 10.1021/acs.jpcc.6b11703

References

1. Goldstein H. (1980) *Classical Mechanics* (2nd ed.). USA: Addison–Wesley.
2. Bubenchikov M.A., Bubenchikov A.M., Mamontov D.V. (2021) Vrashcheniya i vibratsii torov v molekulyarnom komplekse $C_{20}@C_{80}$ [Rotations and vibrations of fullerenes in the molecular complex $C_{20}@C_{80}$]. *Vestnik Tomskogo gosudarstvennogo universiteta. Matematika i mekhanika – Tomsk State University Journal of Mathematics and Mechanics*. 71. pp. 35–48. doi: 10.17223/19988621/71/4
3. Bubenchikov A.M., Bubenchikov M.A., Mamontov D.V., Kaparulin D.S., Lun-Fu A.V. (2021) Vrashchenie torov v structure zhidkogo cristalla [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
4. 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. 1–7. doi: 10.1080/1536383X.2021.1908268
 5. Lun-Fu A.V., Bubenchikov M.A., Bubenchikov A.M., Mamontov D.V., Borodin V.A. (2021) Interaction of molecular tori in columnar structures. *Journal of Physics: Condensed Matter*. 34(12). doi: 10.1088/1361-648X/ac45b9
 6. Hamilton R.W. (1844) On quaternions; or on a new system of imaginaries in Algebra. *The London, Edinburgh, and Dublin Philosophical Magazine and Journal of Science*. 25(169). pp. 489–495. doi: 10.1080/14786444408645047
 7. Denis J.E., Sohail M. (1977) Singularity free algorithm for molecular dynamics simulation of rigid polyatomics. *Molecular Physics*. 34(2). pp. 327–331. doi: 10.1080/00268977700101761
 8. Pawley G.S. (1981) Molecular dynamics simulation of the plastic phase; a model for SF₆. *Molecular Physics*. 43(6). pp. 1321–1330. doi: 10.1080/00268978100102091
 9. Karney C. (2007) Quaternions in molecular modeling. *Journal of Molecular Graphics & Modelling*. 25. pp. 595–604. doi: 10.1016/j.jmgm.2006.04.002
 10. Miller T.F. III, Eleftheriou M., Pattnaik P., Ndirango A., Newns D. (2002) Symplectic quaternion scheme for biophysical molecular dynamics. *The Journal of Chemical Physics*. 116(20). pp. 8649–8659. doi: 10.1063/1.1473654
 11. Chen P.-C., Hologne M., Walker O. (2017) Computing the rotational diffusion of biomolecules via molecular dynamics simulation and quaternion orientations. *The Journal of Physical Chemistry B*. 121(8). pp. 1812–1823. doi: 10.1021/acs.jpccb.6b11703

Сведения об авторах:

Бубенчиков Михаил Алексеевич – доктор физико-математических наук, ведущий научный сотрудник регионального научно-образовательного математического центра 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

Ажеев Сергей Андреевич – магистрант механико-математического факультета Томского государственного университета, Томск, Россия. E-mail: sazheev72@yandex.ru

Ажеев Александр Андреевич – магистрант механико-математического факультета Томского государственного университета, Томск, Россия. E-mail: sazheev@gmail.com

Information about the authors:

Bubenchikov Mikhail A. (Doctor of Physics and Mathematics, Leading Researcher of the Regional Scientific and Educational Mathematical Center, Tomsk State University, Tomsk, Russian Federation). E-mail: michael121@mail.ru

Mamontov Dmitriy V. (Junior Researcher of the Regional Scientific and Educational Mathematical Center, Tomsk State University, Tomsk, Russian Federation). E-mail: orevaore@mail.ru

Azheev Sergey A. (Tomsk State University, Tomsk, Russian Federation). E-mail: sazheev72@yandex.ru

Azheev Aleksandr A. (Tomsk State University, Tomsk, Russian Federation). E-mail: sazheev@gmail.com

Статья поступила в редакцию 20.01.2022; принята к публикации 01.12.2022

The article was submitted 20.01.2022; accepted for publication 01.12.2022