

Научная статья

УДК 51-74, 531.3

doi: 10.17223/19988621/90/6

Высокоточные представления Ван-дер-Ваальсовских взаимодействий

Владислав Иванович Бородин¹, Михаил Алексеевич Бубенчиков²,
Алексей Михайлович Бубенчиков³, Дмитрий Владимирович Мамонтов⁴

¹ ООО «Газпром трансгаз Томск», Томск, Россия

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

¹ borodingttgazprom@mail.ru

² michael121@mail.ru

³ bubenchikov_am@mail.ru

⁴ orevaore@mail.ru

Аннотация. На основе разработанного высокоточного метода расчета динамики каркасных молекул показано, что характер тройных столкновений фуллеренов зависит от энергии вращений сталкивающихся молекулярных объектов. Показано также, что такие столкновения часто приводят к образованию стабильно существующей кинематической пары. В этой паре взаимодействующие объекты перемещаются симметрично по квазиплоским орбитам вокруг центра сформировавшегося дуэта.

Ключевые слова: численное моделирование, молекулярная динамика, фуллерены, нанометериалы

Благодарности: Исследование выполнено при финансовой поддержке гранта РНФ № 19-71-10049.

Для цитирования: Бородин В.И., Бубенчиков М.А., Бубенчиков А.М., Мамонтов М.А. Высокоточные представления Ван-дер-Ваальсовских взаимодействий // Вестник Томского государственного университета. Математика и механика. 2024. № 90. С. 64–77. doi: 10.17223/19988621/90/6

Original article

Highly accurate representations of van der Waals interactions

Vladislav I. Borodin¹, Mikhail A. Bubenchikov²,
Aleksey M. Bubenchikov³, Dmitriy V. Mamontov⁴

¹ Gazprom Transgaz Tomsk, Tomsk, Russian Federation

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

¹ borodingttgazprom@mail.ru

² michael121@mail.ru

³ *bubenchikov_am@mail.ru*

⁴ *orevaore@mail.ru*

Abstract. This paper considers the interactions between two and three fullerenes using the methods of molecular dynamics. The results show that at a time step of one femto-second, very high calculation accuracy can be achieved regarding the kinematic and energy parameters of the interaction. Thus, the details associated with the symmetry of the relative opposition of molecular objects are revealed, and the features and nature of the transition of two-dimensional motions of interacting objects into three-dimensional interaction of fullerenes are clarified, in particular, the interaction with the formation of a kinematic pair. The role of the initial spin of the fullerenes, which disables the transition of kinematic energy from the reservoir of translational energy into rotational energy, is also identified. This makes the formation of a kinematic pair impossible. In the general case, the triple collision of fullerenes is a complex process, in which, even in the special case of plane approximation, three phases can be distinguished: initial planar motion, multi-sheet spatial interaction of three objects, and a double spiral of interacting molecules with the linear motion of the discarded fullerene.

Keywords: numerical modeling, molecular dynamics, fullerenes, nanomaterials

Acknowledgments: This work was financially supported by the Russian Science Foundation (project No. 19-71-10049).

For citation: Borodin, V.A., Bubenchikov, M.A., Bubenchikov, A.M., Mamontov, D.V. (2024) Highly accurate representations of van der Waals interactions. *Vestnik Tomskogo gosudarstvennogo universiteta. Matematika i mekhanika – Tomsk State University Journal of Mathematics and Mechanics*. 90. pp. 64–77. doi: 10.17223/19988621/90/6

Введение

В настоящее время очень популярными для исследования являются самособирающиеся фуллереновые структуры, в частности мономолекулярные слои из фуллеренов C₆₀, где каждый фуллерен связан с соседними молекулами с помощью ковалентных связей [1]. В работе [2] рассмотрен монослойный фуллерен с квазигексагональной фазой (C₆₀). Полученный 2D-молекулярный кристалл демонстрирует высокую кристалличность и хорошую термодинамическую стабильность с широкой запрещенной зоной около 1.6 электронвольт. В исследовании [3] на основе DFT-моделирования произведен теоретический синтез монослойной кристаллической фазы молекул C₆₀. Фаза была названа qNPC₆₀. В работе [4] с помощью моделирования из первых принципов проводится теоретическое исследование новых решеток фуллеренов с последующей оценкой их стабильности и ключевых физических свойств. Прочность на разрыв и модуль упругости таких материалов достигают необычных значений 50 и 300 ГПа. Текущие исследования [5] раскрывают уникальные свойства фотоэлектрических смесей на основе нефуллереновых акцепторов. В работах также исследуется влияние нанопримесей [6–8]. Исследование [9] посвящено изучению самодиффузии молекул флюида в наноканалах методом молекулярной динамики.

Цель настоящей работы – разработка высокоточного метода расчета динамики крупных молекул и на его основе изучение перехода от плоских сближений фуллеренов к пространственному взаимодействию, а также анализ причины образования кинематических пар сближающихся молекул.

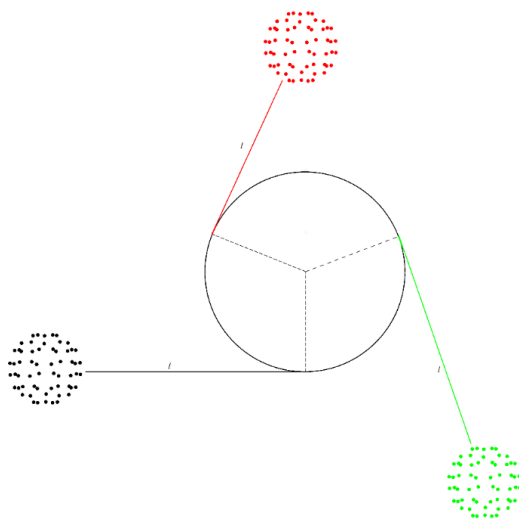


Рис. 1. Схема начального плоского сближения фуллеренов
Fig. 1. Scheme of the initial planar approach of fullerenes

Симметричный характер первоначального сближения молекулярных клеток C60 позволяет лучше понять детали столкновительного взаимодействия фуллеренов. Поэтому рассмотрим плоское симметричное сближение клеток, показанное на рис. 1.

Математическая модель

В настоящей работе фуллерены рассматриваются как абсолютно твердые каркасные структуры с заданным расположением силовых центров (атомов) на кристаллической поверхности. Хотя атомы в углеродной сетке находятся в связанном состоянии, для математического моделирования удобной является модель атом-атомных взаимодействий с эффективными значениями параметров сферического потенциала для атомов углерода, встроенных в кристаллическую сетку графеноподобной структуры. Эти параметры можно определить по температуре небольшой совокупности рассматриваемых фуллеренов, находящихся в адиабатических условиях. Качественная картина взаимодействия отдельных фуллеренов будет слабо зависеть от формы конкретного полуэмпирического потенциала. В результате мы используем классический *LJ*-потенциал, имеющий два параметра в своем представлении.

Движение такой каркасной структуры, как фуллерен, удобнее всего описывать как движение его центра масс и одновременно как поворот всей структуры вокруг этого центра. Для описания этих групп движений существуют уравнения перемещения центров масс каркасных структур, которые в случае трех фуллеренов записываются следующим образом:

$$M \frac{d\mathbf{v}^{(i)}}{dt} = - \sum_{j=1}^N \sum_{k=1}^N \text{grad} U(\xi_{jk}) - \sum_{j=1}^N \sum_{k=1}^N \text{grad} U(\eta_{jk}), \quad (1)$$

$$\frac{d\mathbf{r}^{(i)}}{dt} = \mathbf{v}^{(i)}, \quad i = 1, 2, 3.$$

Здесь $\mathbf{v}^{(i)}$ – скорость центра масс i -го фуллера; $\mathbf{r}^{(i)}$ – радиус-вектор положения этого центра; U – двухпараметрический LJ -потенциал; ξ_{jk} – расстояние между отдельными атомами одной из пар взаимодействующих фуллеренов; η_{jk} – расстояние между атомами во второй паре; M – масса фуллера; N – количество атомов углерода в рассматриваемой каркасной молекуле.

Уравнения перемещения центров масс (1) интегрируются численно при следующих начальных условиях:

$$t = 0, \mathbf{v}^{(i)} = \mathbf{v}_0^{(i)}, \mathbf{r}^{(i)} = \mathbf{r}_0^{(i)}, i = 1, 2, 3. \quad (2)$$

Вторая группа перемещений – это повороты фуллеренов вокруг их собственных центров масс. Повороты описываются уравнениями моментов, а именно для каждого из фуллеренов мы можем записать

$$\frac{d\mathbf{K}^{(i)}}{dt} = \mathbf{M}^{(i)}, i = 1, 2, 3. \quad (3)$$

Здесь $\mathbf{K}^{(i)} = (K_x^{(i)}, K_y^{(i)}, K_z^{(i)})$ – вектор моментов количеств движения i -го фуллера; $\mathbf{M}^{(i)}$ – вектор моментов сил, действующих на отдельный фуллерен. $\mathbf{K}^{(i)}$ чаще называют кинетическим моментом каркасной структуры. Этот вектор определяется как произведение тензора инерции на вектор-столбец угловой скорости и в покомпонентном виде записывается следующим образом:

$$\begin{aligned} K_x^{(i)} &= A^{(i)}\omega_x^{(i)} + F^{(i)}\omega_y^{(i)} + E^{(i)}\omega_z^{(i)}, \\ K_y^{(i)} &= F^{(i)}\omega_x^{(i)} + B^{(i)}\omega_y^{(i)} + D^{(i)}\omega_z^{(i)}, \\ K_z^{(i)} &= E^{(i)}\omega_x^{(i)} + D^{(i)}\omega_y^{(i)} + C^{(i)}\omega_z^{(i)}. \end{aligned} \quad (4)$$

Здесь мы используем способ определения проекций угловой скорости в абсолютных осях, поэтому компоненты тензора инерции на каждом отдельном шаге и даже в каждой отдельной позиции определенного шага по времени вычисляются по следующим формулам:

$$\begin{aligned} A &= m \sum_{j=1}^N (y_j^2 + z_j^2), B = m \sum_{j=1}^N (x_j^2 + z_j^2), C = m \sum_{j=1}^N (x_j^2 + y_j^2), \\ D &= -m \sum_{j=1}^N y_j z_j, E = -m \sum_{j=1}^N x_j z_j, F = -m \sum_{j=1}^N x_j y_j. \end{aligned} \quad (5)$$

В этих формулах индекс « i », отмечающий принадлежность к конкретному фуллерену, опущен; m – масса атома углерода; x, y, z – координаты j -го атома углерода рассматриваемого фуллера. Следуя подходу атом-атомных взаимодействий силовые члены в правых частях уравнений (3) определяются следующим образом:

$$\mathbf{M}^{(i)} = - \sum_{j=1}^N \mathbf{r}_j^{(i)} \times \sum_{k=1}^N \text{grad} U(\xi_{jk}) - \sum_{j=1}^N \mathbf{r}_j^{(i)} \times \sum_{k=1}^N \text{grad} U(\eta_{jk}). \quad (6)$$

Уравнения (3) служат для определения проекций угловых скоростей фуллеренов на оси абсолютного базиса, поэтому для их интегрирования необходимо использовать следующие начальные условия:

$$t = 0, \boldsymbol{\omega}^{(i)} = \boldsymbol{\omega}_0^{(i)}, i = 1, 2, 3. \quad (7)$$

Как кинетические (5), так и силовые (6) моменты, входящие в уравнение вращательной динамики (3), отнесены к неподвижному центру абсолютного базиса,

поэтому радиусы-векторы $\mathbf{r}_j^{(i)}$, определяющие j -й атом углерода в i -м фуллере, отсчитываются от начала неподвижной системы отсчета. По нашей технологии вычислений эти совокупности координат должны быть найдены в процессе решения задачи. Это нетрудно сделать, если воспользоваться теоремой сложения скоростей для силовых центров (атомов углерода) фуллереновой конструкции, участвующих в сложном движении (трансляционном перемещении вместе с центром масс этой конструкции и во вращательном движении вокруг него):

$$\frac{d\mathbf{r}_j^{(i)}}{dt} = \mathbf{v}^{(i)} + \boldsymbol{\omega}^{(i)} \times (\mathbf{r}_j^{(i)} - \mathbf{r}^{(i)}); i = 1, 2, 3; j = 1, \dots, 60. \quad (8)$$

Последние уравнения интегрируются при следующих условиях, определяющих начальную позицию всех силовых центров фуллеренов:

$$t = 0, \mathbf{r}_j^{(i)} = \mathbf{r}_j^i(0); i = 1, 2, 3; j = 2, \dots, 60. \quad (9)$$

Таким образом, предложенная схема расчета поворотов молекулярной конструкции предполагает вычисление мгновенных значений координат всех ее узлов. В результате поворот молекулярной клетки мы можем определить именно этими координатами, что освобождает от необходимости использования углов Эйлера, а также кватернионов Гамильтона, если возникает потребность преодолеть недостатки подхода Эйлера.

Результаты расчетов

Соотношения (1)–(8) составляют математическую постановку задачи динамики трех сближающихся фуллеренов. Все используемые дифференциальные уравнения являются уравнениями первого порядка относительно скоростей и координат узлов и центров масс рассматриваемых молекулярных конструкций, зависящих лишь от одной переменной – времени. Таким образом, чтобы исследовать динамику рассматриваемой ассоциации крупных молекул, необходимо решить эволюционную задачу 558 дифференциальных уравнений первого порядка. Достаточно давно разработаны схемы класса Рунге–Кутты, обладающие формально высоким порядком точности вычислений относительно шага по времени. Эти схемы ориентированы на использование систем обыкновенных дифференциальных уравнений, явно разрешенных относительно искомых величин. В нашем случае уравнения для проекций кинетического момента не разрешены относительно искомых проекций угловых скоростей фуллеренов.

В настоящей работе анализируются вопросы перехода плоских движений молекул в пространственные, образования кинематических пар фуллеренов, сохранения исходных симметрий движения, образования хаоса при движении малых групп молекулярных объектов, поэтому необходимо, чтобы расчетная схема не потеряла своей заявленной точности вычислений. Выполняя разделение разностных уравнений по угловым скоростям прямым методом, опирающимся на обращение матриц соответствующих систем алгебраических уравнений, мы не снизим точность вычислений исходного метода, поскольку прямой метод является точным в своей основе. Высокая точность схем класса Рунге–Кутты определяется перевычислениями искомых величин в промежуточных позициях каждого шага по времени. Если и в промежуточных позициях способ извлечения компонент

угловой скорости будет опираться на правило Крамера, то мы не понизим заявленной точности исходной схемы расчетов.

Последовательный и глубокий синтез схем разделения угловых перемещений с идеями пересчета в рамках отдельного шага по времени позволил добиться высоких результатов по точности вычислений. На рис. 2, 3 показаны относительные погрешности расчетов полной энергии системы фуллеренов (см. рис. 2) и относительные величины каждой из трех проекций для кинетического момента для системы в целом (см. рис. 3). Такие погрешности можно вычислить благодаря существованию четырех интегралов уравнений движения, имеющих место в рассматриваемых условиях реализации процесса взаимодействия фуллеренов. Во-первых, в системе отсутствует диссипация, или подвод энергии. Значит, кинетическая энергия системы, сложенная с потенциальной энергией взаимодействия элементов, остается постоянной во все время движения. Кроме того, отсутствует момент внешних сил, действующих на рассматриваемую систему. Это приводит к тому, что вектор кинетического момента сохраняет свое положение во времени в пространстве. Это эквивалентно постоянству трех проекций кинетического момента на оси какого-либо базиса. Найденные величины проекций суммарного момента количества движения системы отнесли к начальной величине кинетического момента. Следуя схеме, показанной на рис. 1, мы имеем ненулевое значение суммарного момента. Начальное значение кинетической энергии также отлично от нуля, поскольку рассматривается ситуация активного сближения элементов системы. Таким образом имеем

$$\varepsilon = \frac{H - H(0)}{H(0)}, \varepsilon_x = \frac{K_x - K_x(0)}{K(0)}, \varepsilon_y = \frac{K_y - K_y(0)}{K(0)}, \varepsilon_z = \frac{K_z - K_z(0)}{K(0)}. \quad (10)$$

Здесь H , K – полная энергия системы и модуль кинетического момента; $H(0)$, $K(0)$ – их начальные значения. Как видно из рис. 2, 3, рассчитанные при шаге по времени в одну фемтосекунду величины рассматриваемых погрешностей имеют порядок 10^{-9} безразмерных единиц. Такой порядок погрешности вычислений говорит о высокоточных расчетах молекулярной динамики.

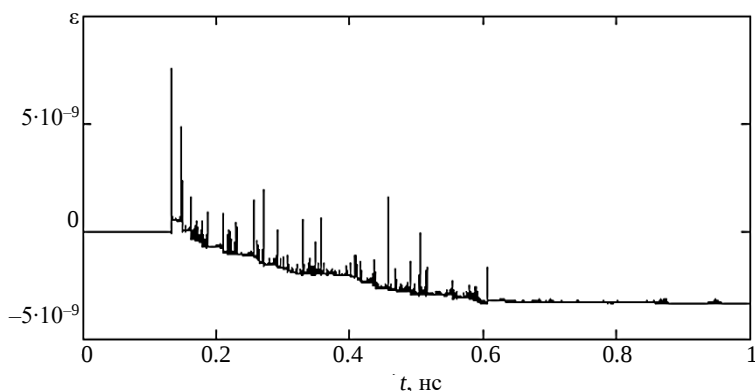


Рис. 2. Относительная погрешность вычисления полной энергии системы
Fig. 2. Relative error in the calculations of total energy of the system

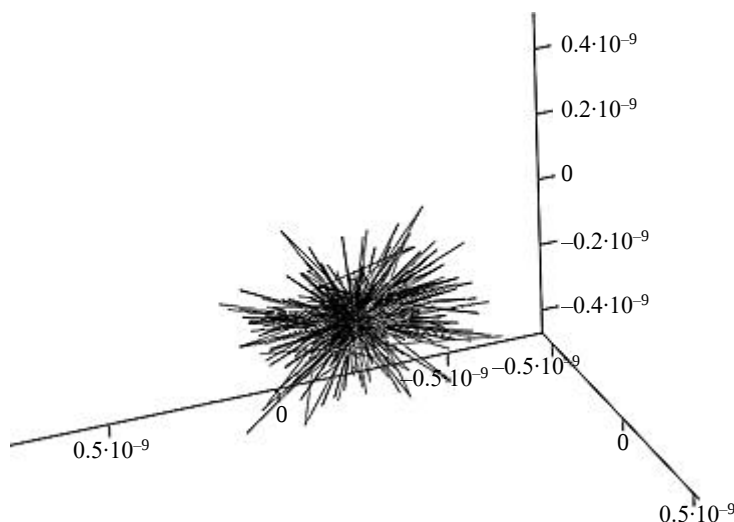


Рис. 3. Относительные погрешности проекции кинетического момента системы фуллеренов

Fig. 3. Relative errors in the projection of the angular momentum of a fullerene system

Как видим из рис. 3, все погрешности расчетов кинетического момента укладываются в куб с ребром $0.5 \cdot 10^{-9}$ безразмерных единиц.

Относительное движение кинематической пары фуллеренов

Симметричный характер начального сближения фуллеренов, показанный на рис. 1, и отсутствие внешних сил, действующих на систему из трех фуллеренов, предполагают, что во все время движения центр масс этой системы будет оставаться в состоянии покоя. Центр масс рассматриваемой ассоциации фуллеренов возьмем за начало абсолютной системы отсчета. Пусть $\mathbf{r}^{(1)}(t)$ – радиус-вектор центра первого фуллерена (черная кривая на рис. 1); $\mathbf{r}^{(2)}(t)$ – радиус-вектор второго фуллерена (красная кривая); $\mathbf{r}^{(3)}(t)$ – третьего (зеленая кривая).

Даже при образовании кинематической пары и в том случае, когда возникает разлет частей первичной ассоциации фуллеренов и третий фуллерен с удвоенной скоростью удаляется от начала абсолютной системы отсчета, положение центра масс системы остается неизменным. При этом если кинематическую пару составляют черный и красный фуллерены, то центр масс пары будет определяться радиус-вектором

$$\mathbf{r}^{(1,2)} = (\mathbf{r}^{(1)} + \mathbf{r}^{(2)}) / 2. \quad (11)$$

Тогда разности векторов

$$\mathbf{r}^{(1)} - (\mathbf{r}^{(1)} + \mathbf{r}^{(2)}) / 2 = (\mathbf{r}^{(1)} - \mathbf{r}^{(2)}) / 2, \quad (12)$$

$$\mathbf{r}^{(2)} - (\mathbf{r}^{(1)} + \mathbf{r}^{(2)}) / 2 = (\mathbf{r}^{(2)} - \mathbf{r}^{(1)}) / 2 \quad (13)$$

будут определять положения каждого из фуллеренов дуэта в системе координат, связанной с перемещением их центра масс. Из (2) и (3) следует, что любая пара

фуллеренов в рассматриваемом классе задач обладает симметрией противостояния относительно центра пары даже если движение этого центра не является инерциальным, как в первой и второй фазах сложного взаимодействия трех фуллеренов. На рис. 4 показаны два ракурса траекторий черного и красного фуллеренов (составляющих стабильный направленно перемещающийся дуэт) в системе координат, связанной с их общим центром. По этим траекториям мы можем сделать заключение об относительном движении составляющих пары.

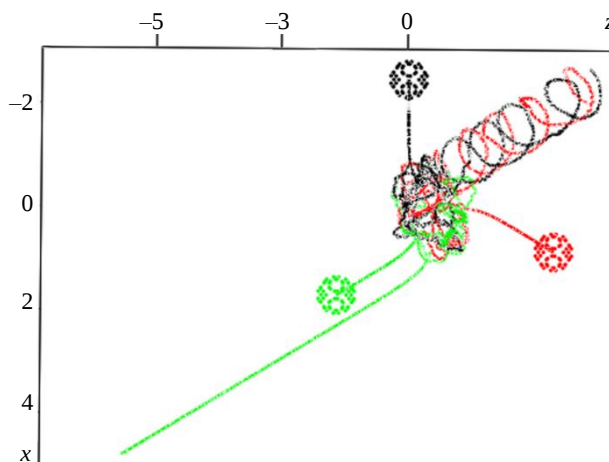


Рис. 4. Трансляционное взаимодействие трех фуллеренов
Fig. 4. Translational interaction of three fullerenes

Рисунок 4 представляет полную картину взаимодействия трех фуллеренов. Здесь к третьей фазе относится двойная красно-черная спираль, а также зеленый прямолинейный фрагмент траектории. Рисунок 5 крупным планом представляет вторую фазу. Наконец, рис. 6 показывает вторую и третью фазы взаимодействия с перемещающимся центром масс красного и черного фуллеренов. Здесь каждая из спиралей выражается в кольцо. На рис. 7 (слева) можно видеть, как для этого случая (отсутствия спинов у фуллеренов) происходит генерация вращательного движения каркасных молекул. С первого же столкновения, которое происходит при $t = 0.125$ нс, они раскручиваются до уровня скоростей 800 нс^{-1} . После столкновения начинается вторая фаза взаимодействия, которая характеризуется большими изменениями амплитуды колебаний угловой скорости. Эта стадия происходит на интервале времени $[0.125, 0.6]$ нс. Затем на третьей стадии, при $t = 0.6$ нс, колебания частот заметно успокаиваются. При этом третий фуллерен, поскольку он выходит из ассоциации взаимодействующих молекул, т.е. значительно удаляется от кинематической пары, получает постоянную для третьей фазы взаимодействия скорость порядка 300 нс^{-1} . Необходимо отметить, что вторая фаза еще не является зоной симметрии, поскольку вращательная энергия в ней распределена неравномерно по элементам системы. Третья фаза в отношении фуллеренов, составляющих кинематическую пару, является существенно более симметричной. То же самое можно сказать и в отношении трансляционных движений, представленных на рис. 7 (справа). Здесь также явно видны три фазы взаимодействия и видна стабилизация флуктуаций в третьей фазе.

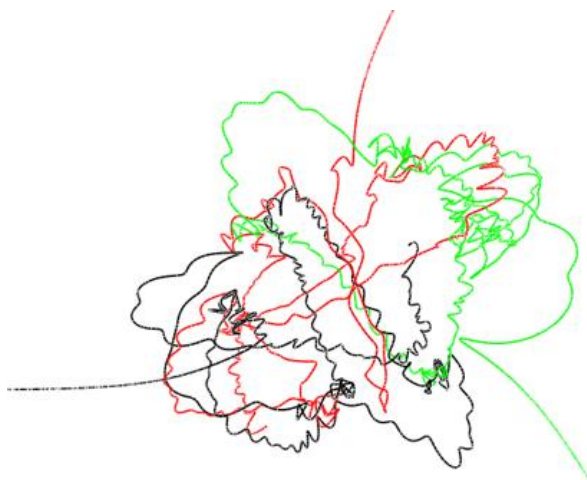


Рис. 5. Крупный план второй фазы взаимодействия
Fig. 5. Close-up view of the second phase interaction

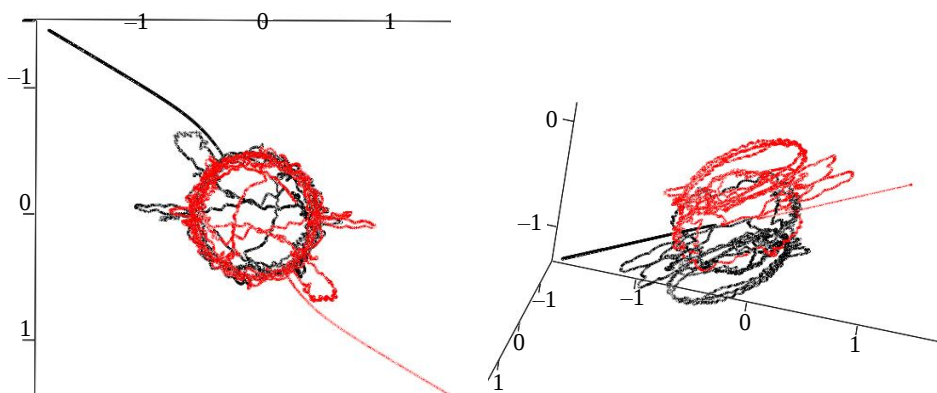


Рис. 6. Взаимные относительные положения фуллеренов
Fig. 6. Mutual relative positions of the fullerenes

На рис. 8 и 9 показан характер тройных столкновений при относительно высоких значениях начальных вращений фуллеренов. Тройное столкновение обычно завершается образованием кинематической пары с отходящим от нее в противоположном направлении с удвоенной (относительно скорости центра масс пары) скоростью третьим свободным фуллереном. Однако это происходит лишь до определенного уровня начальных скоростей вращения. Как показывают расчеты, при одинаковых спинах всех фуллеренов это предельное значение есть $\omega^0 = 366$ ГГц. Дальнейшее увеличение начальной частоты приводит к изменению характера взаимодействия рассматриваемых конструкций. На рис. 9 показано два ракурса тройного столкновения при $\omega^0 = 367$ ГГц. Видно, что после удара фуллерены выходят из плоскости начальных положений. Через их центры масс, конечно, проходит плоскость, но она будет отклонена от исходной на определенный угол. После удара фуллерены будут двигаться с постоянными линейными скоростями,

направления которых уже не лежат в плоскостях их положений. Вся совокупность скоростей положений будет параллельна одной плоскости из-за того, что отраженные фуллерены будут двигаться по прямолинейным траекториям и иметь постоянные скорости, т.е. молекулы всегда находятся в однопараметрическом семействе параллельных плоскостей, составляющих определенный угол с плоскостью их начальных положений. Таким образом, в рассматриваемом примере полностью отсутствует вторая фаза взаимодействия наночастиц и не происходит образования кинематической пары фуллеренов.

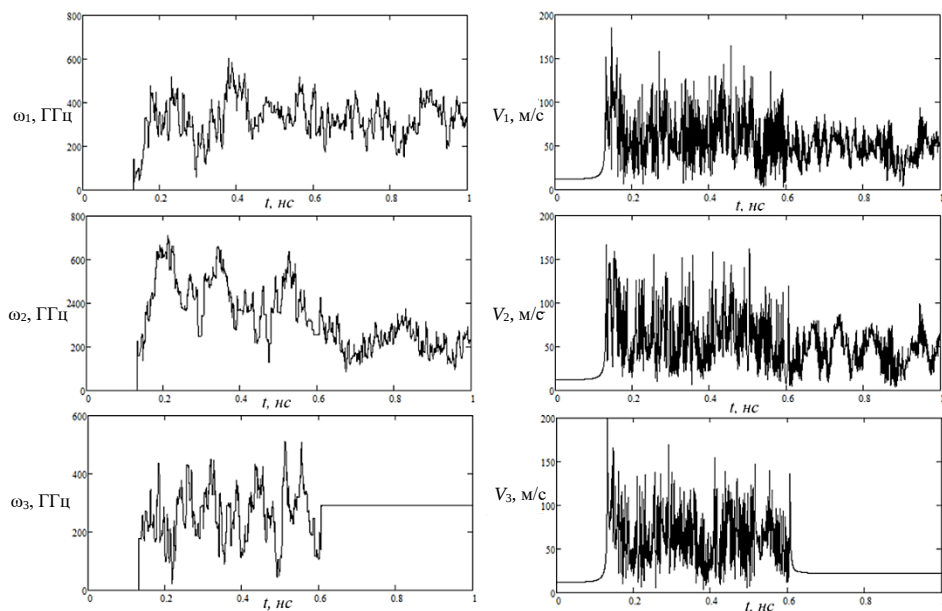


Рис. 7. Полные угловые (слева) и трансляционные (справа) скорости взаимодействующих фуллеренов

Fig. 7. Total angular (on the left) and translational (on the right) velocities of the interacting fullerenes

На рис. 4 показана картина плоского сближения фуллеренов, их столкновение и переход в пространственное движение с образованием кинематической пары. Анализ траекторий показывает, что во взаимодействии трех фуллеренов можно выделить фазу плоского сближения, фазу пространственного взаимодействия трех молекулярных объектов с образованием кинематической пары и фазу разлета пары и третьего фуллерена. В дальнейшем будем называть их первая, вторая и третья фазы. На рис. 5 крупным планом представлена вторая фаза. Глядя на эту картину, можно выделить фрагменты траекторий, составляющих плоские лепестки спутанного бутона. Здесь также имеется симметрия, которую трудно разглядеть на плоской проекции сложной пространственной картины. Трудность восприятия такой симметрии заключается в том, что она относится к какой-либо паре фуллеренов и реализуется в подвижной системе, связанной с движением центра масс рассматриваемой пары. При этом третий фуллерен (его центр масс)

участвует в этой симметрии тогда, когда мы рассматриваем другую пару, куда он непосредственно входит. Плоские лепестковые фрагменты траекторий первоначально могут находиться в исходной плоскости (плоскости начального положения фуллеренов). Потом плоскости лепестков поворачиваются относительно первичной плоскости на определенный угол, зависящий от характера критического сближения фуллеренов. Таким образом, даже во второй фазе трансляционные движения фуллеренов далеко не являются полным хаосом. Что касается третьей фазы, то здесь (см. рис. 6) перемещения фуллеренов являются еще более определенными.

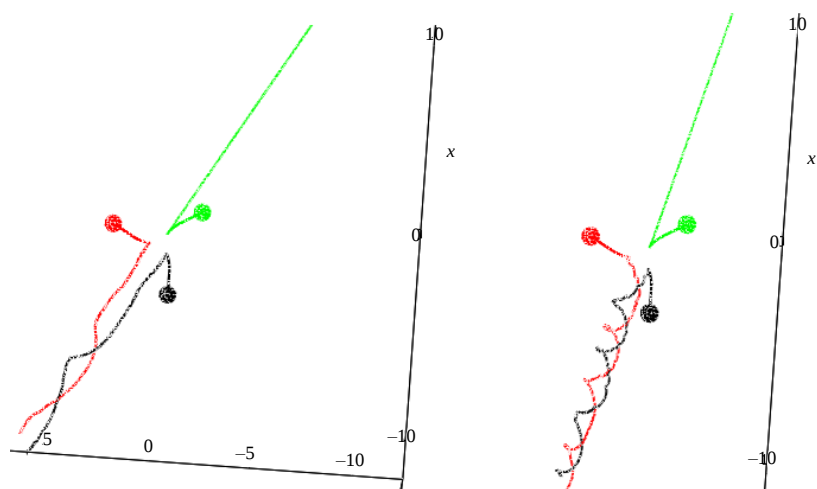


Рис. 8. Траектории центров масс фуллеренов при угловых скоростях каждой молекулы 365 ГГц (слева) и 366 ГГц (справа)

Fig. 8. Trajectories of the centers of mass of the fullerenes at angular velocities of each molecule of 365 GHz (on the left) and 366 GHz (on the right)

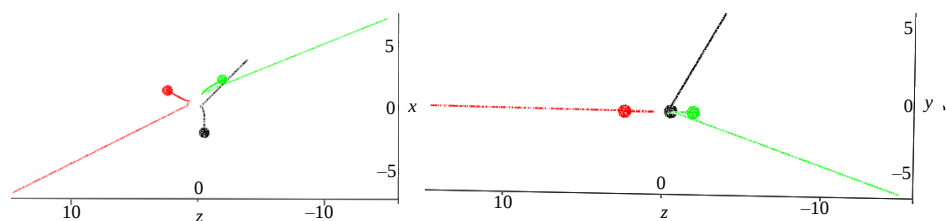


Рис. 9. Два ракурса траекторного столкновения при $\omega^0 = 367$ ГГц

Fig. 9. Two angles of the trajectory collision at $\omega^0 = 367$ GHz

В данном случае движение каждого из фуллеренов, находящихся в паре во второй фазе взаимодействия, осуществляется по кольцевым траекториям. Причем кольца траекторий разнесены в пространстве, но при этом наблюдается симметрия противостояния относительно центра пары удаляющегося от области первоначального взаимодействия с постоянной скоростью. Таким образом кинематическая пара существует в стабильном состоянии.

Заключение

Показано, что при шаге по времени в одну фемтосекунду может быть достигнута очень высокая точность расчета относительно кинематических и энергетических параметров взаимодействия, что позволило выявить детали, связанные с симметрией относительного противостояния молекулярных объектов, а также разъяснить особенности и характер перехода плоских движений взаимодействующих объектов в пространственное взаимодействие фуллеренов, в частности взаимодействие с образованием кинематической пары. Вскрыта также роль начального спина фуллеренов, который перекрывает возможности перехода кинематической энергии из резервуара трансляционной энергии в энергию вращений, и это делает невозможным образование кинематической пары.

Таким образом, тройное столкновение фуллеренов в общем случае является сложным процессом, в котором даже в частном случае плоских сближений можно выделить три фазы: начальное плоское движение, многолистное пространственное взаимодействие трех объектов и двойная спираль взаимодействующих молекул с линейным движением отброшенного фуллерена.

Список источников

1. Baskar A.V., Benzigar M.R., Talapaneni S.N., Singh G., Karakoti A. S., Yi J., Al-Muhtaseb A.H., Ariga K., Ajayan P.M., Vinu A. Self-Assembled Fullerene Nanostructures: Synthesis and Applications // *Advanced Functional Materials*. 2022. V. 32. Art. 2106924. doi: 10.1002/adfm.202106924
2. Hou L., Cui X., Guan B., Wang S., Li R., Liu Y., Zhu D., Zheng J. Synthesis of a monolayer fullerene network // *Nature*. 2022. V. 606. P. 507–510. doi: 10.1038/s41586-022-04771-5
3. Tromer R., Ribeiro L., Galvao D. A DFT study of the electronic, optical, and mechanical properties of a recently synthesized monolayer fullerene network // *Chemical Physics Letters*. 2022. V. 804. Art. 139925. doi: 10.1016/j.cplett.2022.139925
4. Mortazavi B. Structural, electronic, thermal and mechanical properties of C60-based fullerene two-dimensional networks explored by first-principles and machine learning // *Carbon*. 2023. V. 213. Art. 118293. doi: 10.1016/j.carbon.2023.118293
5. Guangqing Z., Ming Z., Xu J., Yankang Y., Hao T., Zhu L., Zhou L., Zhu H., Zou Y., Wei G., Zhang Y., Liu F. Spontaneous Carrier Generation and Low Recombination in High-Efficiency Non-fullerene Solar Cells // *Energy & Environmental Science*. 2022. V. 15. P. 3486–3493. doi: 10.1039/D2EE01327D
6. Афанасьева С.А., Бирюков Ю.А., Белов Н.Н. и др. Повышение эффективности высокоскоростного метания ударников с применением высокоэнергетических топлив с нанодисперсными наполнителями // *Вестник Томского государственного университета. Математика и механика*. 2012. № 2 (18). С. 67–79.
7. Крайнов А.Ю., Порязов В.А., Моисеева К.М. Скорость распространения пламени в аэрозвеси наноразмерного порошка алюминия // *Вестник Томского государственного университета. Математика и механика*. 2018. № 53. С. 95–106.
8. Ворожцов А.Б., Данилов П.А., Жуков И.А. и др. Влияние внешних воздействий на расплав и неметаллических наночастиц на структуру и механические характеристики легких сплавов на основе алюминия и магния // *Вестник Томского государственного университета. Математика и механика*. 2020. № 64. С. 91–107.
9. Андрищенко В.А., Рудяк В.Я. Самодиффузия молекул флюида в наноканалах // *Вестник Томского государственного университета. Математика и механика*. 2012. № 2. С. 63–66.

References

1. Baskar A.V., Benzigar M.R., Talapaneni S.N., Singh G., Karakoti A.S., Yi J., Al-Muhtaseb A.H., Ariga K., Ajayan P.M., Vinu A. (2022) Self-assembled fullerene nanostructures: synthesis and applications. *Advanced Functional Materials*. 32. Article 2106924. doi: 10.1002/adfm.202106924
2. Hou L., Cui X., Guan B., Wang S., Li R., Liu Y., Zhu D., Zheng J. (2022) Synthesis of a monolayer fullerene network. *Nature*. 606. pp. 507–510. doi: 10.1038/s41586-022-04771-5
3. Tromer R., Ribeiro L., Galvao D. (2022) A DFT study of the electronic, optical, and mechanical properties of a recently synthesized monolayer fullerene network. *Chemical Physics Letters*. 804. Article 139925. doi: 10.1016/j.cplett.2022.139925
4. Mortazavi B. (2023) Structural, electronic, thermal and mechanical properties of C₆₀-based fullerene two-dimensional networks explored by first-principles and machine learning. *Carbon*. 213. Article 118293. doi: 10.1016/j.carbon.2023.118293
5. Guanqing Z., Ming Z., Xu J., Yankang Y., Hao T., Zhu L., Zhou L., Zhu H., Zou Y., Wei G., Zhang Y., Liu F. (2022) Spontaneous carrier generation and low recombination in high-efficiency non-fullerene solar cells. *Energy & Environmental Science*. 15. pp. 3486–3493. doi: 10.1039/D2EE01327D
6. Afanas'eva S.A., Biryukov Yu.A., Belov N.N., Burkin V.V., Ishchenko A.N., Kartashov Yu.I., Kasimov V.Z., Fomenko V.V., Yugov N.T. (2012) Povyshenie effektivnosti vysokoskorostnogo metaniya udarnikov s primeneniem vysokoenergeticheskikh topliv s nanodispersnymi napolnitelyami [Increase of efficiency of high-speed throwing of strikers application of high-energy fuels with nanodispersed fillers]. *Vestnik Tomskogo gosudarstvennogo universiteta. Matematika i mekhanika – Tomsk State University Journal of Mathematics and Mechanics*. 2(18). pp. 67–79.
7. Kraynov A.Yu., Poryazov V.A., Moiseeva K.M. (2018). Skorost' rasprostraneniya plameni aerovzvesi nanorazmernogo poroshka alyuminiya [Flame propagation velocity in an aerosuspension of nanoscale aluminum powder]. *Vestnik Tomskogo gosudarstvennogo universiteta. Matematika i mekhanika – Tomsk State University Journal of Mathematics and Mechanics*. 53. pp. 95–106. doi: 10.17223/19988621/53/9
8. Vorozhtsov A.B., Danilov P.A., Zhukov I.A., Khmeleva M.G., Platov V.V., Valikhov V.D. (2020) Vliyanie vneshnikh vozdeystviy na rasplav i nemetallicheskih nanochastits na strukturu i mekhanicheskie kharakteristiki legkikh splavov na osnove alyuminiya i magniya [The effect of external actions on a molten metal and the influence of nonmetallic nanoparticles on the structure and mechanical properties of the light alloys based on aluminum and magnesium]. *Vestnik Tomskogo gosudarstvennogo universiteta. Matematika i mekhanika – Tomsk State University Journal of Mathematics and Mechanics*. 64. pp. 91–107. doi: 10.17223/19988621/64/7
9. Andryushchenko V.A., Rudyak V.Ya. (2012) Samodiffuziya molekul flyuida v nanokanalakh [Self-diffusion of fluid molecules in nanochannels]. *Vestnik Tomskogo gosudarstvennogo universiteta. Matematika i mekhanika – Tomsk State University Journal of Mathematics and Mechanics*. 2(18). pp. 63–66.

Сведения об авторах:

Бородин Владислав Иванович – Генеральный директор ООО «Газпром трансгаз Томск» (Томск, Россия), аспирант Томского государственного университета (Томск, Россия). E-mail: borodinttgazprom@mail.ru

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

Бубенчиков Алексей Михайлович – доктор физико-математических наук, профессор кафедры теоретической механики Томского государственного университета (Томск, Россия). E-mail: bubenchikov_am@mail.ru

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

Information about the authors:

Borodin Vladislav I. (Chief Executive Officer, Lead Engineer, Gazprom Transgaz Tomsk, Tomsk State University, Tomsk, Russian Federation). E-mail: borodingtgazprom@mail.ru

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

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

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

Статья поступила в редакцию 01.03.2024; принята к публикации 05.08.2024

The article was submitted 01.03.2024; accepted for publication 05.08.2024