

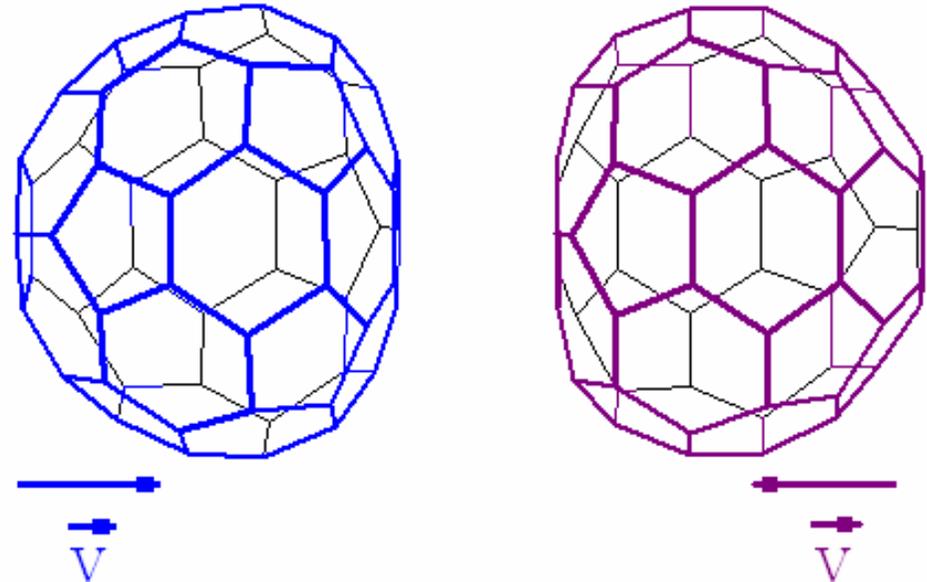
## Углеродные нанокластеры как элементы наностроительств

### Лекция 2.

Наностройства на базе многослойных фуллеренов.

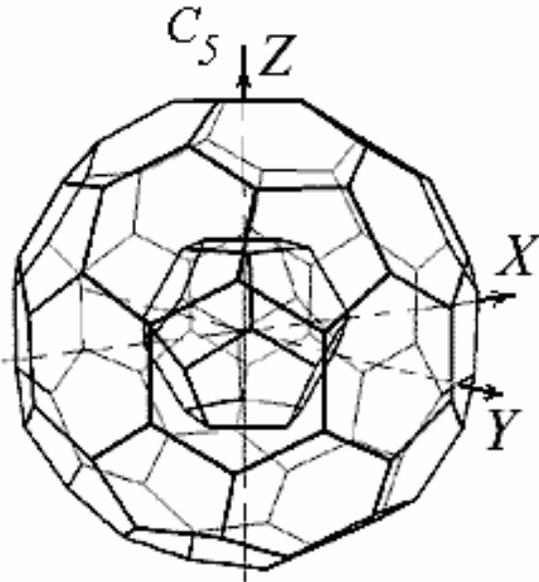
Наногироскоп – свободно вращающийся фуллерен/тубулен в поле удерживающего потенциала внешней оболочки (фуллерена или нанотрубки).

Нанотермодатчик на основе двухслойного фуллерена с нецентральным эффектом.

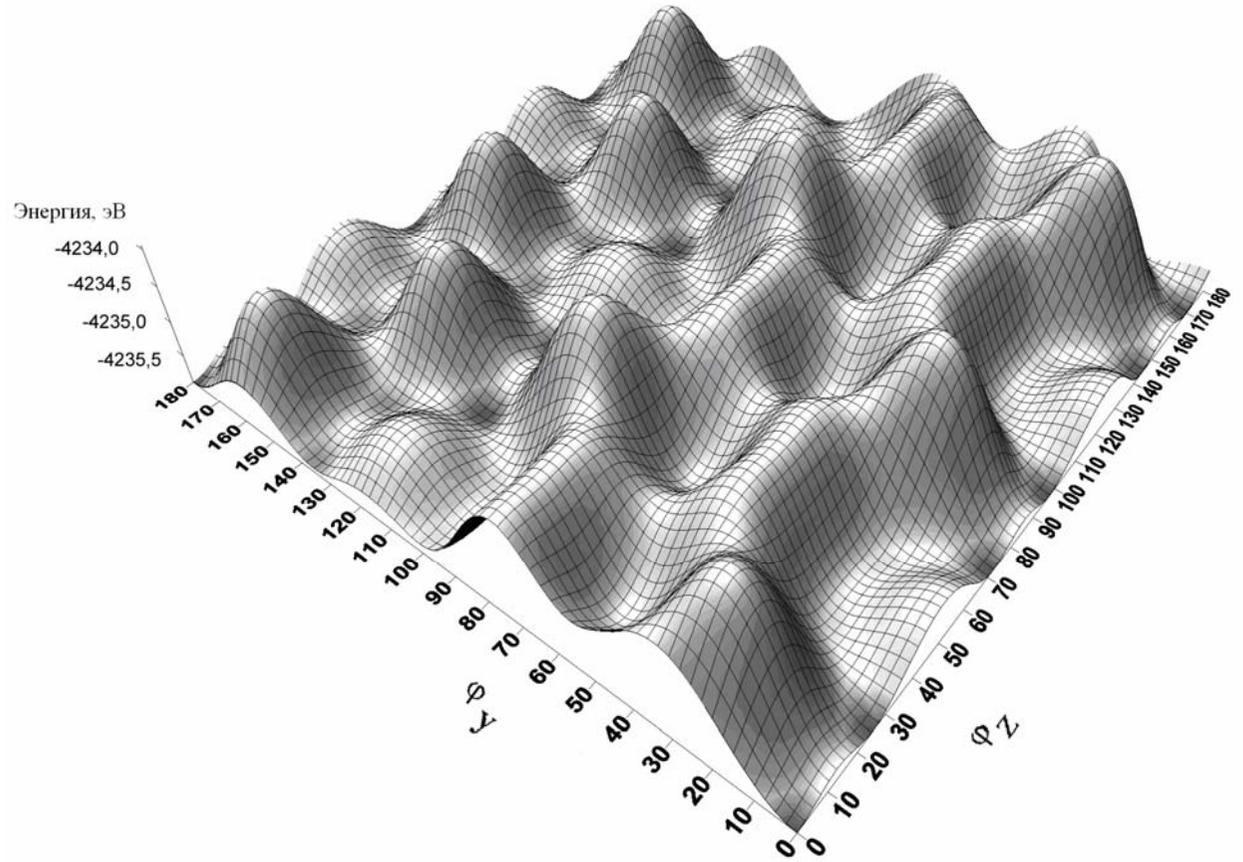


## Центрированные фуллерены

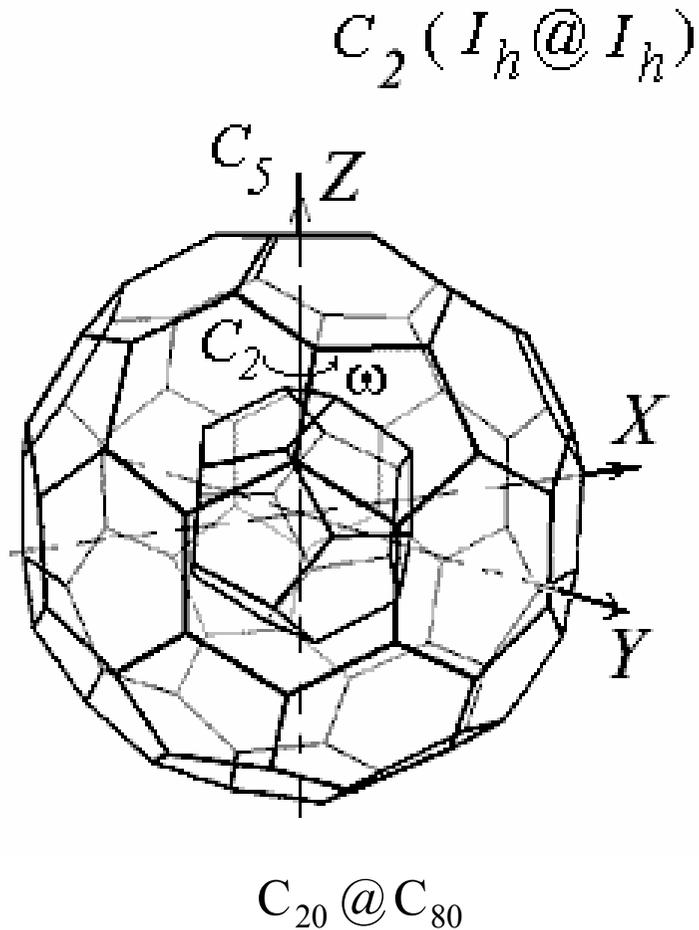
$C_5 (I_h @ I_h)$



$C_{20} @ C_{80}$  В ОСНОВНОМ СОСТОЯНИИ

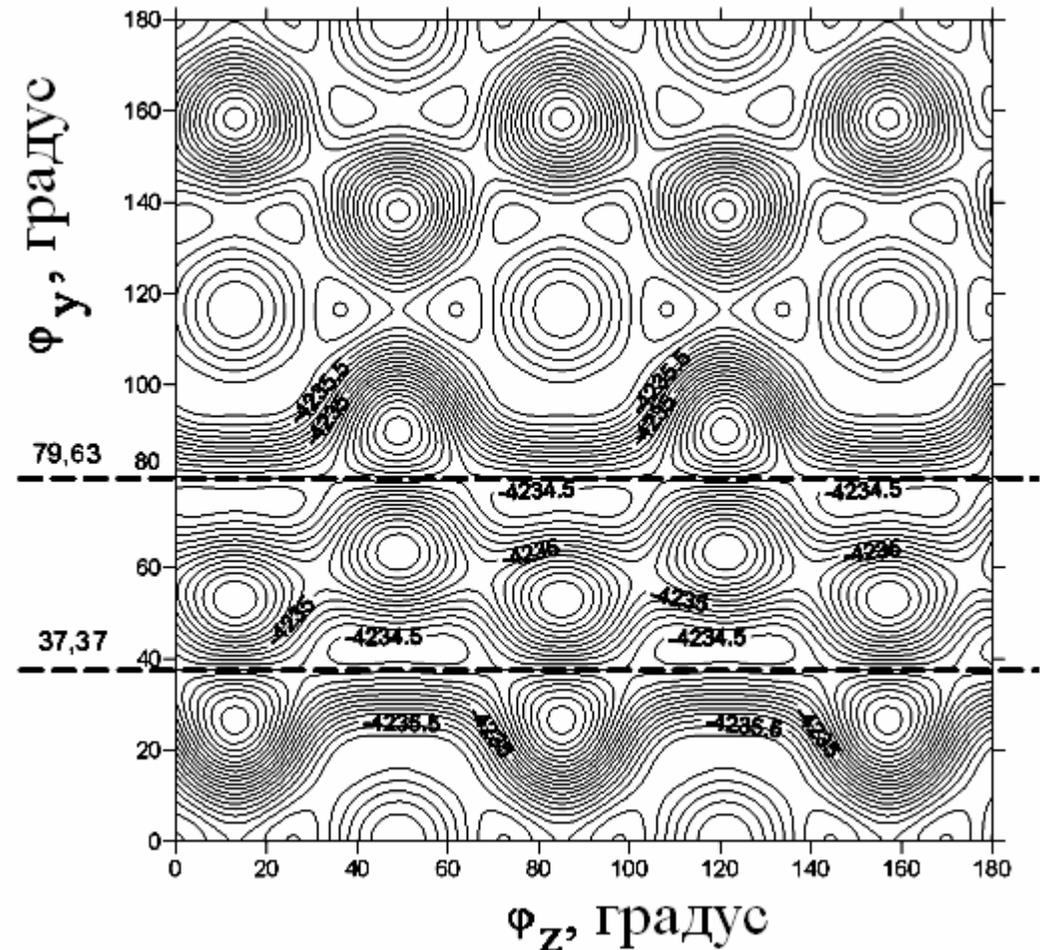


Энергетическая поверхность



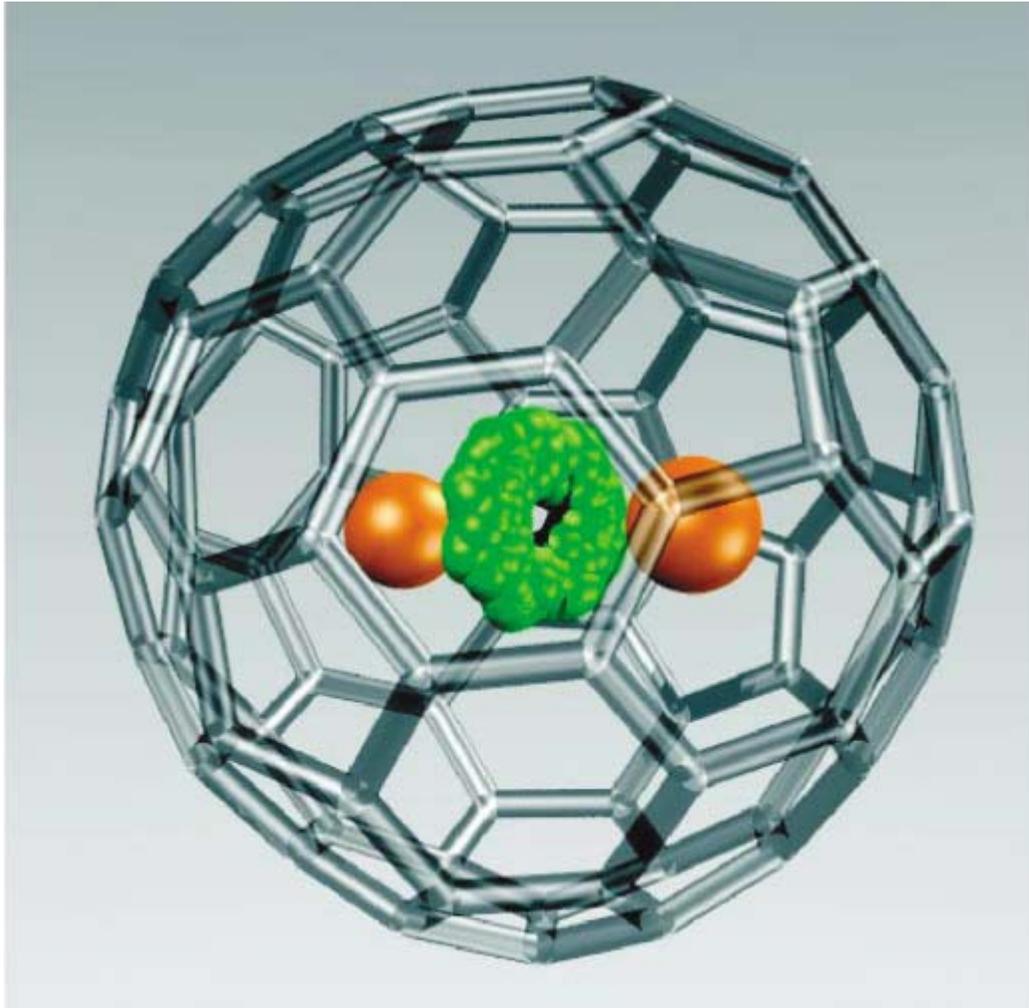
в состоянии свободного вращения  $C_{20}$

Фуллерен  $C_{20}$  является шаровым волчком с моментом инерции  $J = 8,332 \cdot 10^{-38} \text{ г} \cdot \text{см}^2$  и частотой  $\omega = 4,07 \cdot 10^9 \text{ рад/с}$  ( $6,48 \cdot 10^8 \text{ с}^{-1}$ ). Для сравнения при  $T = 300 \text{ К}$  у молекулы дезоксирибонуклеиновой кислоты с радиусом витка  $6,7 \text{ \AA}$ , частота  $\omega = 3,8 \cdot 10^8 \text{ рад/с}$ .



Карта изолиний

## Экспериментальные исследования наногироскопа

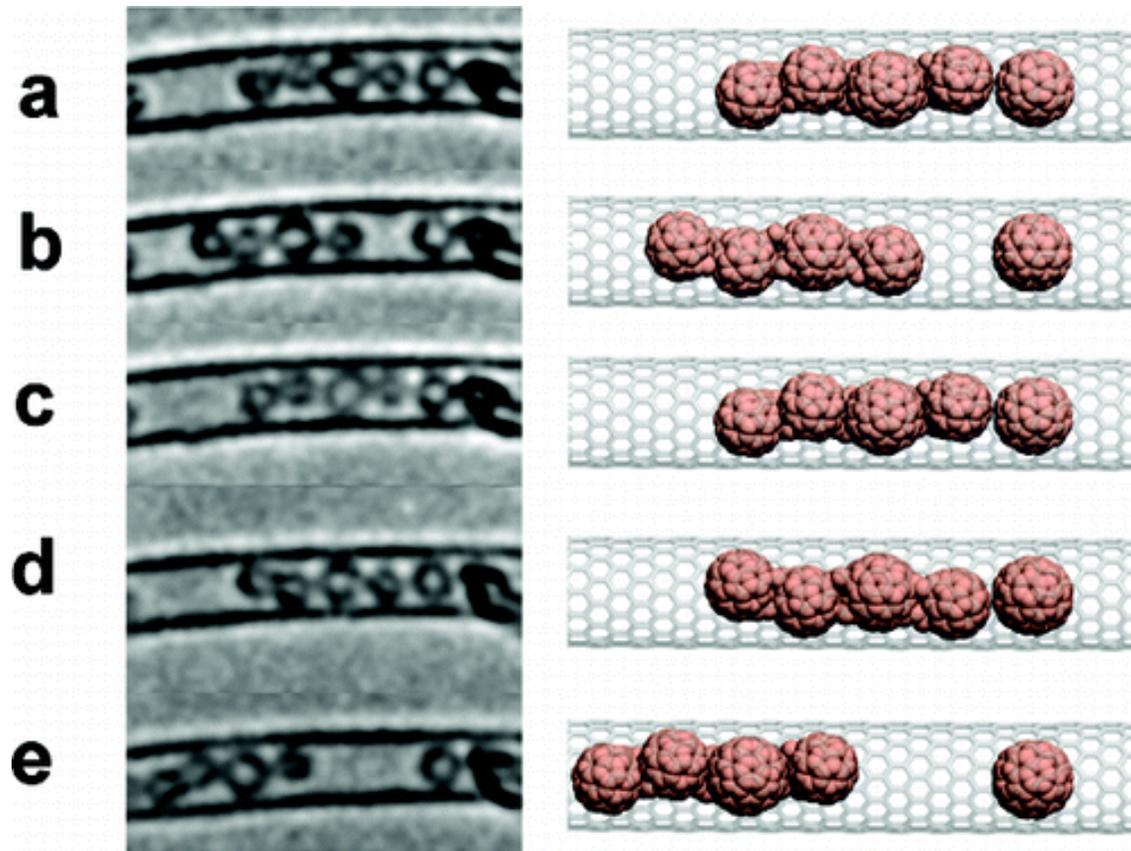


Структура C<sub>2</sub>Sc<sub>2</sub>@C<sub>84</sub>.

Оранжевые сферы – атомы скандия, в центре – молекула C<sub>2</sub> (вид электронного облака, рассчитанного методом методом функционала плотности).

M. Krause, M. Hulman, H. Kuzmany, O. Dubay, G. Kresse, K. Vietze, G. Seifert, C. Wang, and H. Shinohara **Fullerene Quantum Gyroscope** // Phys.Rev. Lett., V. 93, N. 13.

*Экспериментальное исследование вращения фуллеренов в поле удерживающего потенциала нанотрубки*

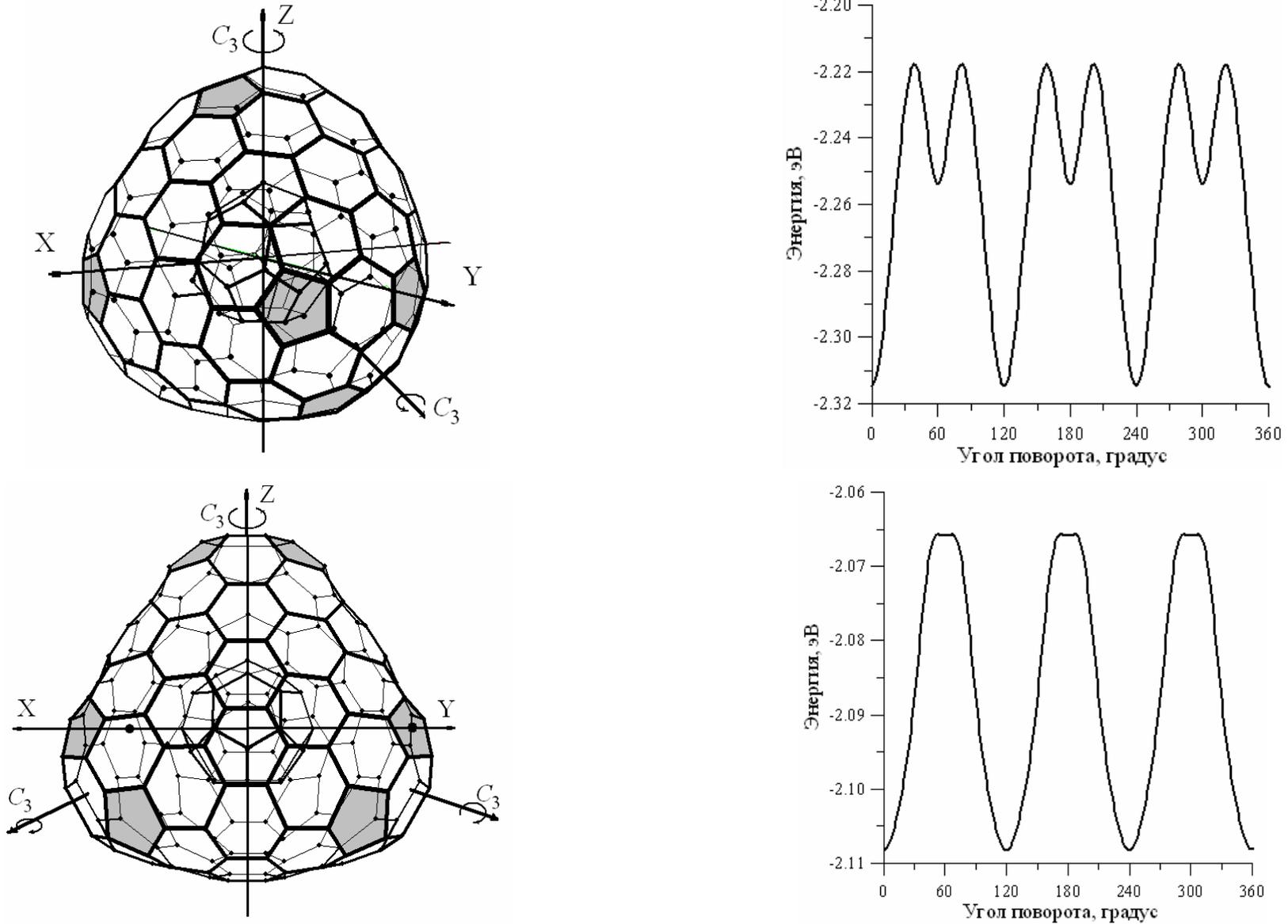


Вращение цепочки из фуллеренов  $C_{60}$ , сплавленных электронным пучком.

Полученная структура  $C_{300}$  свободно вращается в полости трубки.

Jamie H. Warner et al. Rotating Fullerene Chains in Carbon Nanopeapods // *Nano Lett.*, **2008**, 8 (8), pp 2328–2335

## Свободное вращение фуллера в поле $T_d$ -фуллера



Энтальпия образования наночастиц равна -86 Ккал/моль и -68 Ккал/моль

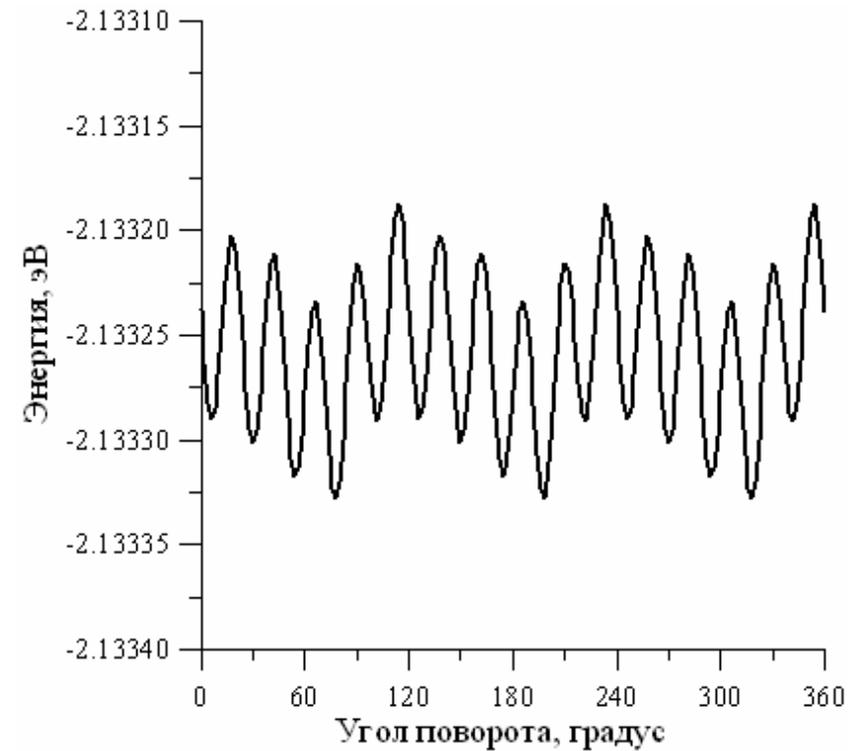
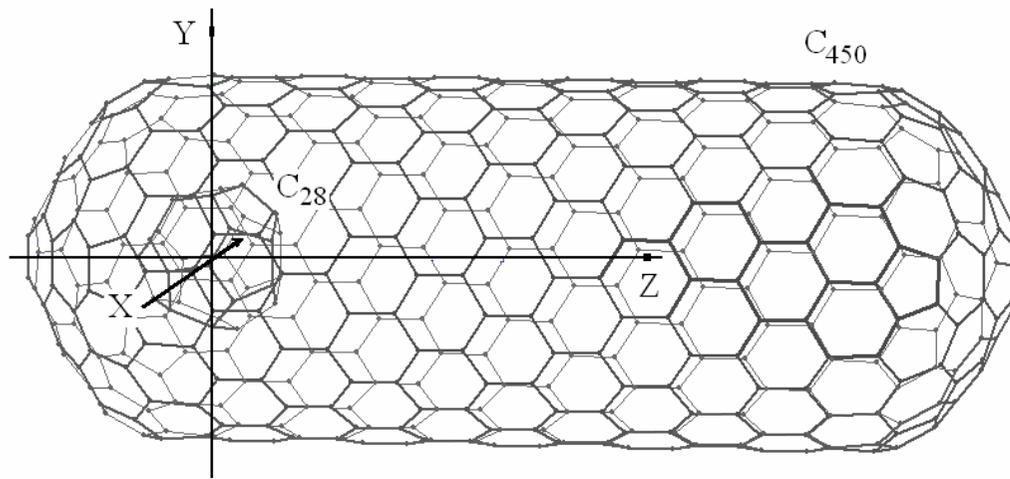
Фуллерен  $C_{28}$  является шаровым волчком (атомный остов не претерпевает изомеризации). Однако, в поле удерживающего потенциала  $C_{28}$  является симметричным волчком. Собственные значения  $J_\zeta$  обозначим буквой  $k$ :  $k=-J, \dots, +J$ , где  $J$  (целое число) – величина момента волчка. Тогда в состоянии с определенными значениями  $J$  и  $k$  энергия равна:

Три главных момента инерции совпадают  $I_A=I_B=I_C=2,23 \cdot 10^{-37} \text{ Г} \cdot \text{см}^2$  (А, В, С отвечают осям X, Y, Z). Вращение фуллерена  $C_{28}$  около оси Z.

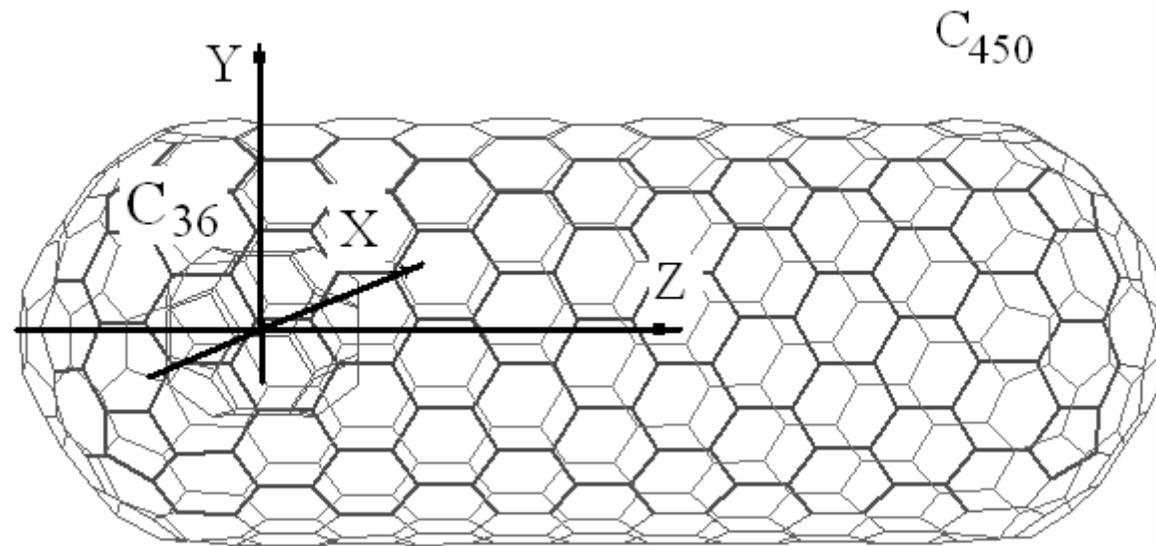
Стационарные вращательные состояния характеризуются тремя квантовыми числами: моментом вращения  $J$ , его проекцией  $J_\zeta$  на ось волчка и его проекцией  $J_z$  на фиксированную в пространстве ось z. В нашем случае  $J_\zeta$  и  $J_z$  совпадают.

$$E_k^J = \frac{\hbar^2}{2I_A} J(J+1) + \frac{\hbar^2}{2} \left( \frac{1}{I_C} - \frac{1}{I_A} \right) k^2.$$

## *Свободное вращение фуллерена в поле нанотрубки*

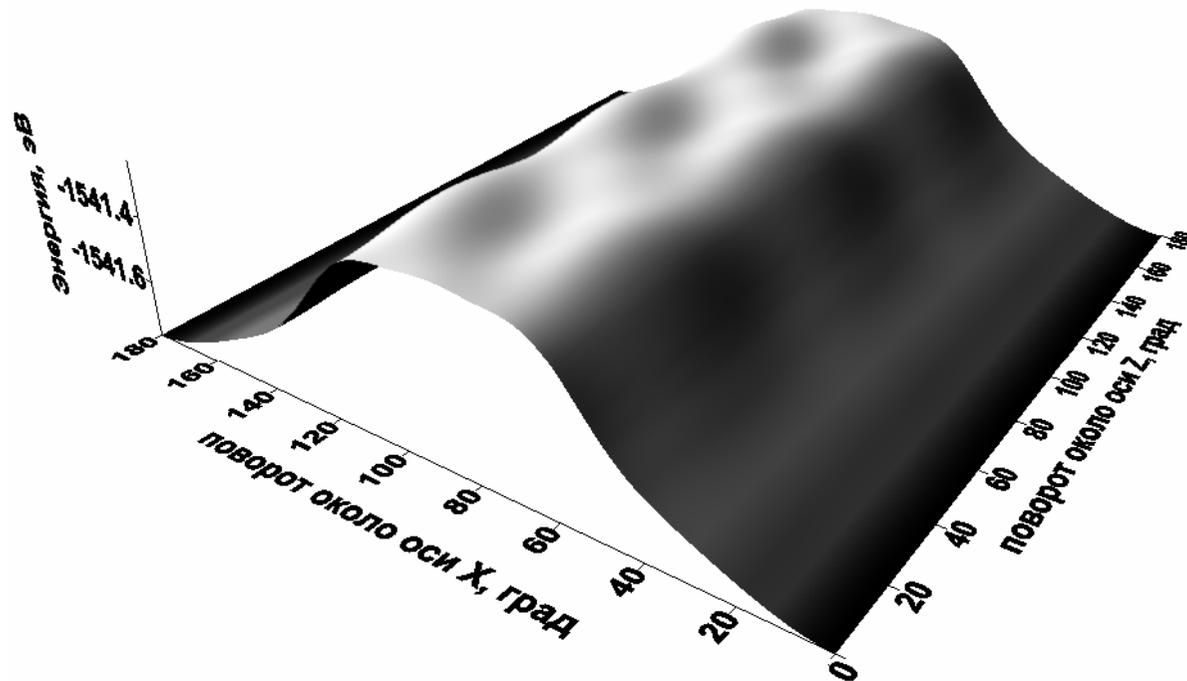


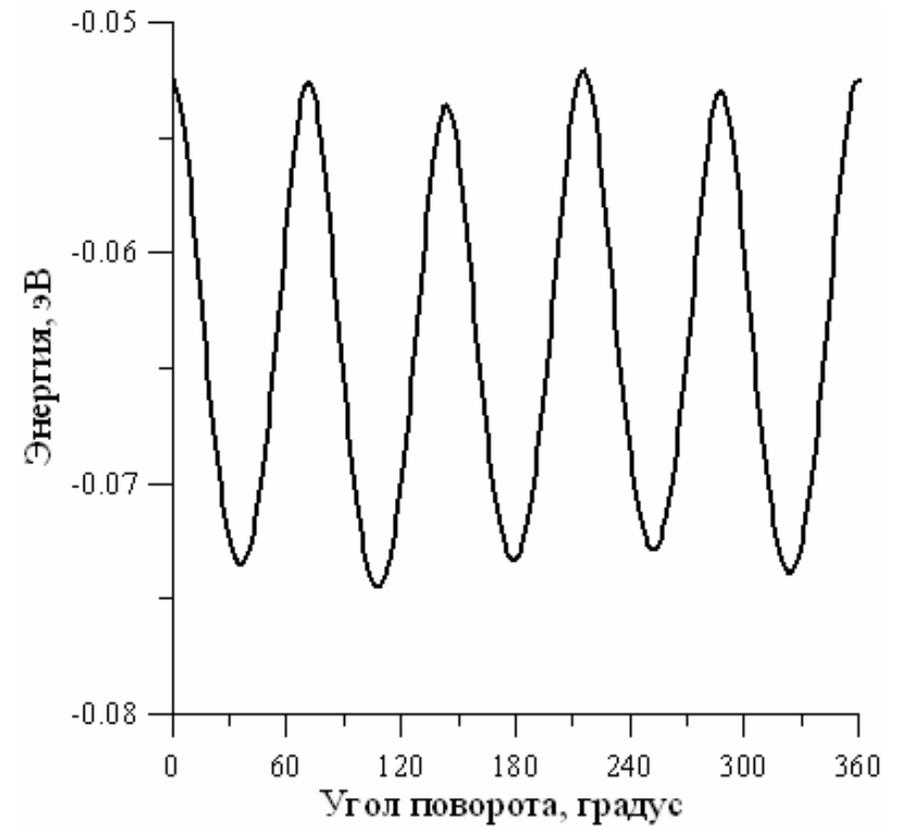
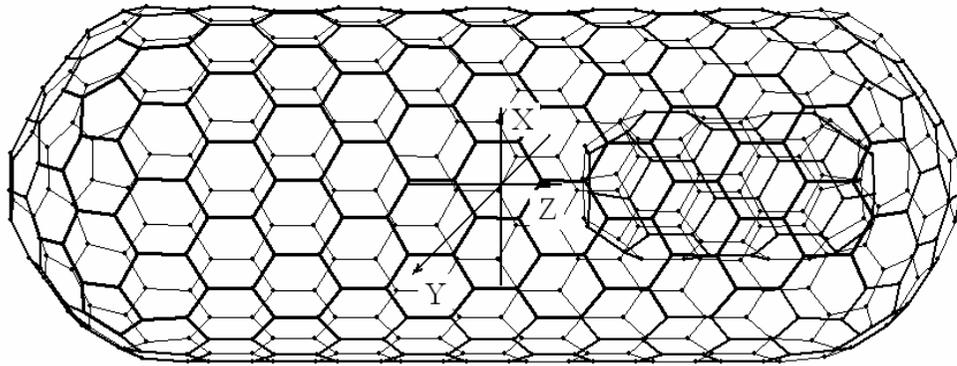
Наночастица C<sub>28</sub>@C<sub>450</sub>: а) конфигурация, соответствующая основному состоянию, б) изменение энергии взаимодействия фуллерена с нанотрубкой при повороте около оси Z



Наночастица  $C_{36}@C_{450}$ :

а) конфигурация, соответствующая основному состоянию,  
 б) поверхность энергии взаимодействия фуллерена с нанотрубкой при поворотах около осей Z и X



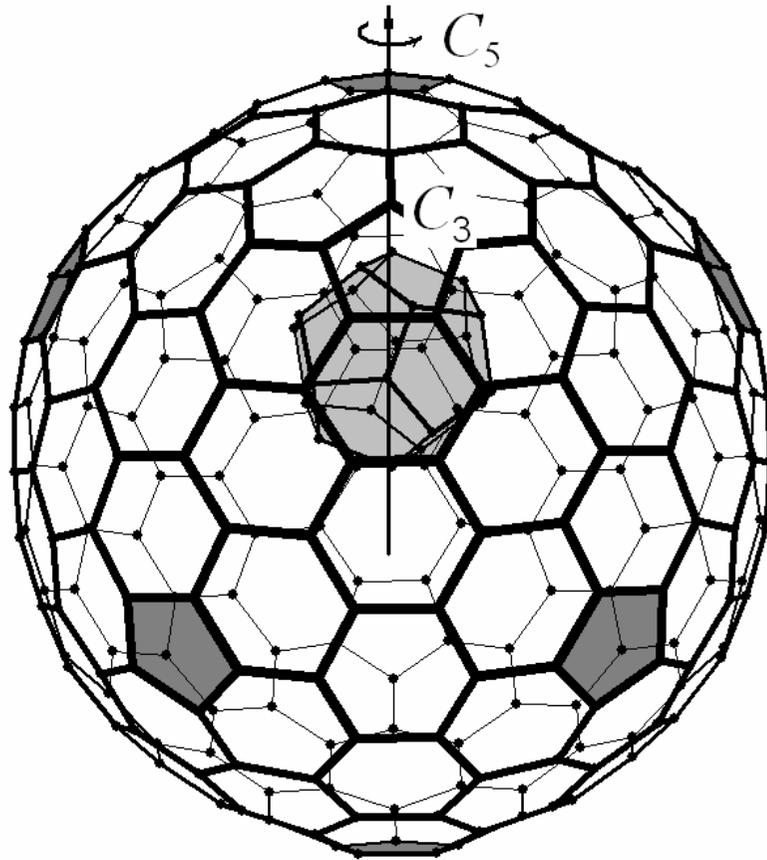


Наночастица C<sub>60</sub>@C<sub>450</sub>:

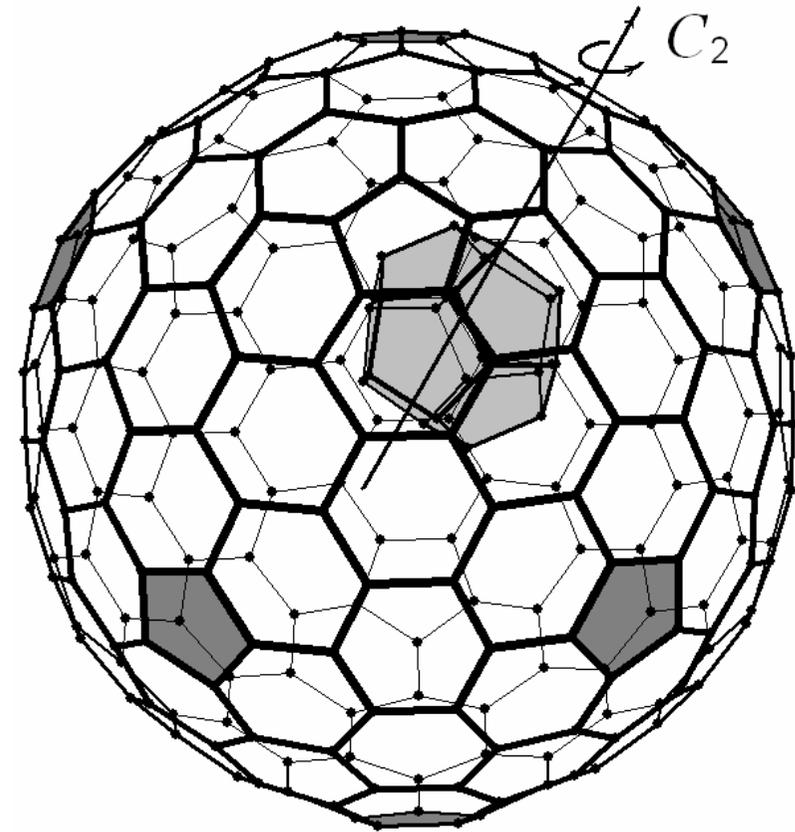
- а) конфигурация, соответствующая основному состоянию,
- б) изменение энергии взаимодействия нанокластера с нанотрубкой при повороте около оси Z

## Фуллерены с нецентральной эффeктом

$C_{20}@C_{240}$

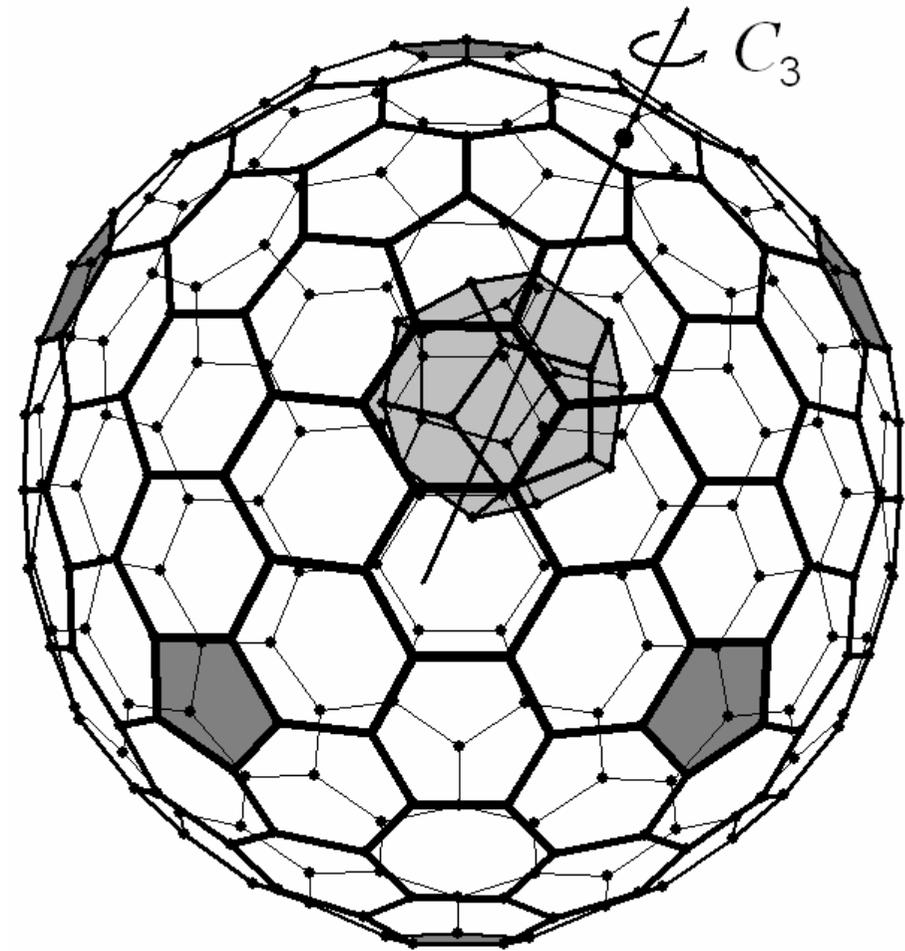


энергии взаимодействия слоев  
наночастицы –  $E_1 = -1,126$  эВ

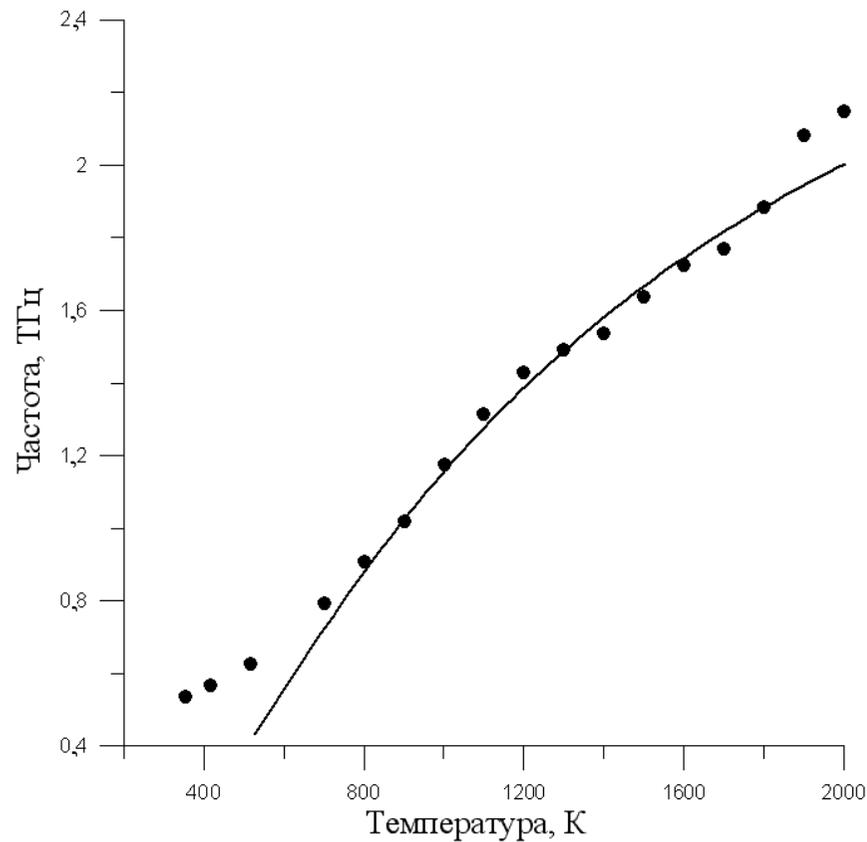


энергии взаимодействия слоев  
наночастицы –  $E_2 = -1,114$  эВ

Позиционирование  $C_{20}$  в поле удерживающего потенциала фуллерена  $C_{240}$ , соответствующее энергии  $E_3 = -1,113$  эВ взаимодействия слоев наночастицы



## Калибровочная характеристика фуллеренового нанотермодатчика

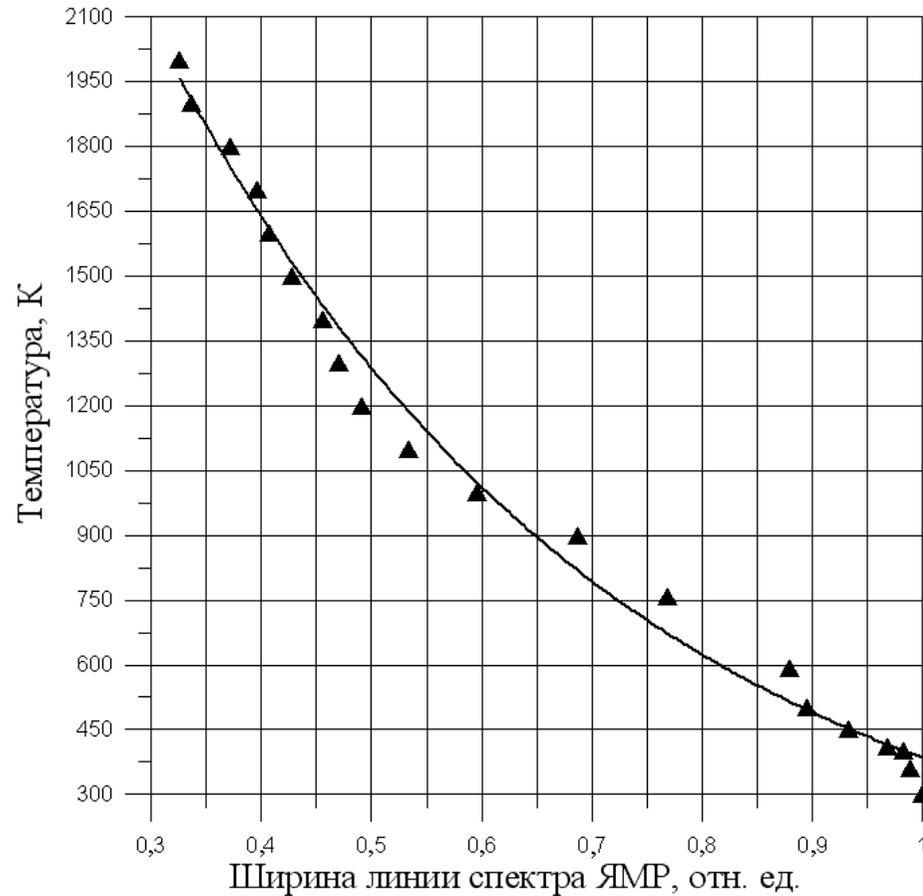


Зависимость частоты перескока фуллерена C<sub>20</sub> из одной потенциальной ямы в другую в поле удерживающего потенциала C<sub>240</sub> от температуры. Точками отмечены результаты численного эксперимента, сплошной линией — результат интерполяции формулой Аррениуса

Соотношение Аррениуса, определяющее температурную релаксацию:

$$\nu = A \cdot e^{-B/kT}, \quad (9.4)$$

где  $\nu$  — частота перескока C<sub>20</sub> между потенциальными ямами для температуре T; численные значения эффективного потенциального барьера B=1096K и коэффициента A = 3,47 ТГц найдены методом Хука-Дживса.



Калибровочная характеристика фуллеренового нанотермодатчика  $C_{20}@C_{240}$

Калибровочная характеристика нанотермодатчика есть зависимость температуры от полуширины спектральной линии ЯМР фуллерена (в контексте статьи –  $C_{20}$ ). Известно, что относительная полуширина резонансной линии (по уровню 0,5 максимума поглощаемой атомом фуллерена мощности) для температуры  $T$ , может быть вычислена по формуле:

$$(\Delta\omega)_T = (\Delta\omega)_1^2 \frac{1}{\nu}, \quad (9.5)$$

где  $(\Delta\omega)_1$  – полуширина линии покоящегося фуллерена  $C_{20}$ .

Рассчитывалась нормированная по  $(\Delta\omega)_{300K} = 0,7013(\Delta\omega)_1^2$  полуширина спектральной линии –  $(\Delta\tilde{\omega})_T$ .

Результаты численного расчета калибровочной характеристики нанотермодатчика – на рисунке. Кривая представляет результат расчета по формуле

$$T = 4298,755 \cdot \exp\left(-\frac{(\Delta\tilde{\omega})_T}{0,4144}\right), \quad (9.6)$$

отражающей интерполяцию данных численного эксперимента.