



ВЕСТНИК ПНИПУ. МЕХАНИКА

№ 3, 2019

PNRPU MECHANICS BULLETIN

<http://vestnik.pstu.ru/mechanics/about/inf/>



DOI: 10.15593/perm.mech/2019.3.10

УДК 519.622.2: 539.231

МОДЕЛИРОВАНИЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ФУЛЛЕРИТА C_{60} С ПОДЛОЖКОЙ ТВЕРДОГО ТЕЛА

С.В. Суворов, А.В. Северюхин, А.В. Вахрушев

УдмФИЦ УрО РАН, Ижевск, Россия

О СТАТЬЕ

Получена: 22 апреля 2019 г.

Принята: 23 сентября 2019 г.

Опубликована: 17 октября 2019 г.

Ключевые слова:

фуллерен, фуллерит, твердое тело, подложка, кристалл, молекулярная динамика, температура, скорость, ребро, грань, вершина.

АННОТАЦИЯ

Широкое применение углерода в различных отраслях машино- и приборостроения обусловило большое количество исследований, связанных с его наноразмерными аллотропными формами – графеном, нанотрубками, фуллереном и фуллеритом. В данной статье исследовался процесс взаимодействия фуллерита C_{60} с подложкой твердого тела с целью установления условий, при которых сам фуллерит или образующие его фуллерены осаждаются на поверхности подложки. Практическим следствием проводимых изысканий может стать создание новых износостойких покрытий.

Исследование процесса взаимодействия фуллерита C_{60} с подложкой твердого тела проводилось при различных параметрах системы. В исследовании варьировались: температура системы – 300, 700, 1150 К; скорость движения фуллерита – 0,005, 0,01, 0,02 Å/фс; ориентация фуллерита относительно подложки. Вектор скорости фуллерита C_{60} направлялся по нормали к верхней поверхности подложки. Ориентация фуллерита определяла, какой частью он будет взаимодействовать с подложкой – гранью, ребром или вершиной. В качестве подложки моделировался кристалл железа Fe(100). Для проведения компьютерного моделирования применялся программный комплекс LAMMPS, использующий методы молекулярной динамики.

Результатами проведенных исследований являются выявленные закономерности поведения фуллерита C_{60} в целом и фуллеренов, входящих в его состав, в частности при контакте с подложкой. Так, например, установлено, что с увеличением скорости фуллерита C_{60} количество фуллеренов, осаждающихся на подложке, уменьшается. Кроме того, ориентация фуллерита C_{60} относительно подложки оказывает значительное влияние как на процесс их взаимодействия, так и на поведение осевших фуллеренов.

© ПНИПУ

© Суворов Степан Валентинович – к.ф.-м.н., с.н.с., e-mail: ssv.82@mail.ru, ID: 0000-0003-3051-7732.

Северюхин Александр Валерьевич – к.ф.-м.н., с.н.с., e-mail: severfam@mail.ru, ID: 0000-0002-9319-5681.

Вахрушев Александр Васильевич – д.ф.-м.н., проф., e-mail vakhrushev-a@yandex.ru, ID: 0000-0001-7901-8745.

Stepan V. Suvorov – CSc of Physical and Mathematical, Senior Researcher, e-mail: ssv.82@mail.ru,

ID: 0000-0003-3051-7732.

Alexander V. Severiuchin – CSc of Physical and Mathematical, Senior Researcher, e-mail: severfam@mail.ru,

ID: 0000-0002-9319-5681.

Alexander V. Vakhrushev – Doctor of Physical and Mathematical Sciences, Professor,

e-mail vakhrushev-a@yandex.ru, ID: 0000-0001-7901-8745.



Эта статья доступна в соответствии с условиями лицензии Creative Commons Attribution-NonCommercial 4.0 International License (CC BY-NC 4.0)

This work is licensed under a Creative Commons Attribution-NonCommercial 4.0 International License (CC BY-NC 4.0)

SIMULATION OF THE INTERACTION FULLERITE C₆₀ WITH THE SUBSTRATE SOLIDS

S.V. Suvorov, A.V. Severiuchin, A.V. Vakhrushev

UdmFRC UB RAS, Izhevsk, Russian Federation

ARTICLE INFO

Received: 22 April 2019
Accepted: 23 September 2019
Published: 17 October 2019

Keywords:

fullerene, fullerite, solid, substrate, crystal, molecular dynamics, temperature, velocity, edge, face, top.

ABSTRACT

The widespread use of carbon in various branches of engineering and instrumentation has led to a large amount of research related to its nanoscale allotropic forms – graphene, nanotubes, fullerene, and fullerite. In this article, we studied the process of interaction of fullerite C₆₀ with a solid substrate in order to establish the conditions under which fullerite itself or its fullerenes are deposited on the surface of the substrate. The application of the research can be the creation of new wear-resistant coatings.

The study of the interaction of fullerite C₆₀ with a solid substrate was carried out at various parameters of the system. The study has the following conditions: system temperatures – 300, 700, 1150 K; the speed of motion of fullerite is 0.005, 0.01, 0.02 Å/fs; fullerite orientation relative to the substrate. The velocity vector of fullerite C₆₀ was directed along the normal to the upper surface of the substrate. The orientation of fullerite determined by what part it will interact with the substrate – “face”, “edge” or “top”. An iron crystal Fe (100) was simulated as a substrate. To carry out computer simulation, the LAMMPS software package was used, which uses molecular dynamics methods.

The results of the research are the revealed patterns of behavior of fullerite C₆₀ in general, and fullerenes in its composition in particular, upon contact with the substrate. For example, it was found that with an increase in the rate of fullerite C₆₀, the number of fullerenes deposited on the substrate decreases. In addition, the orientation of fullerite C₆₀ relative to the substrate has a significant impact on both the process of their interaction and the behavior of settled fullerenes.

© PNRPU

Введение

Начало XXI века охарактеризовалось большим объемом теоретических и экспериментальных исследований в области наноматериалов и нанотехнологий, в том числе материалов и технологий, использующих такие аллотропные формы углерода, как фуллерен и фуллерит [1–11].

В работах [12, 13] приведен обзор различных форм углеродных соединений и их современное применение.

В работах [14–16] исследовалось взаимодействие с твердым телом как отдельного фуллерена, так и фуллеренового кластера. В данной работе будет исследоваться процесс взаимодействия фуллерита C₆₀ с подложкой твердого тела.

Фуллерены, являющиеся одной из аллотропных форм углерода, способны образовывать молекулярные кристаллы, называемые фуллеритами.

В работе [17] указаны основные свойства и параметры фуллеритов, в том числе и фуллерита C₆₀:

– структура кристалла фуллерита может быть как гранецентрированной кубической, так и гексагональной, при этом гранецентрированная кубическая структура является предпочтительной;

– при температуре выше 259 К имеет место вращение молекул фуллеренов в узлах решетки фуллерита, при температуре ниже 259 К такое вращение отсутствует;

– постоянная кристаллической решетки при вращении молекул фуллеренов составляет (1,4154±0,0003) нм, при статическом положении фуллеренов (1,4111±0,0003) нм.

В работе [18] с помощью аппарата молекулярной динамики изучены механические и структурные свойства фуллерита различного состава.

Целью данной работы является моделирование процесса взаимодействия фуллерита C₆₀ с подложкой твердого тела.

1. Постановка задачи

Подложка твердого тела моделировалась как кристалл железа Fe(100) с кубической объемно-центрированной кристаллической решеткой, постоянная решетки 2.87 Å [16]. Кристаллическая решетка фуллерита C₆₀ принята как гранецентрированная кубическая с постоянной, равной 1,4154 нм. Расчетная ячейка имеет периодические граничные условия.

На рис. 1 изображена система «подложка–фуллерит C₆₀» в начальный момент времени. Здесь рассматривались три варианта ориентации фуллерита C₆₀ по отношению к подложке – грань, ребро и вершина.

До момента соударения фуллерита C₆₀ с подложкой твердого тела ему придавалась скорость, вектор которой был направлен по нормали к верхней грани кристалла железа, а модуль составлял соответственно 0,005, 0,01, 0,02 Å/фс. В таком случае кинетическая энергия каждого из фуллеренов, входящих в состав фуллерита, составит: при скорости 0,005 Å/фс – 0,93 эВ, при скорости 0,01 Å/фс – 3,73 эВ, при скорости 0,02 Å/фс – 14,94 эВ.

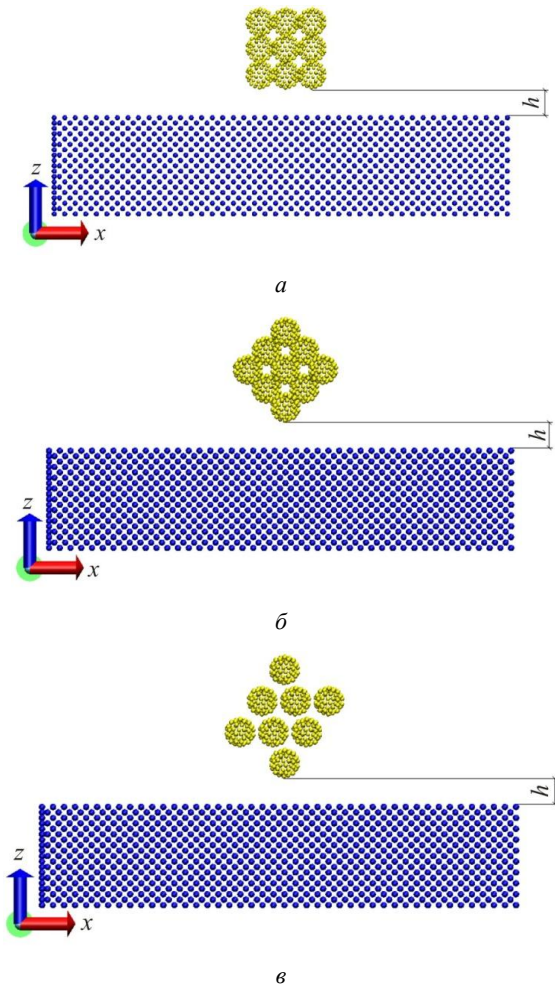


Рис. 1. Фуллерит C₆₀ и подложка железа: а – грань; б – ребро; в – вершина

Fig. 1. Fullerite C₆₀ and iron substrate: a – face; b – edge; c – top

Расстояние h от верхней грани подложки до фуллерита C₆₀ составляла 11,5 Å.

После контакта фуллерита C₆₀ с кристаллом железа скорость, которая была ему придана, обнулялась.

В системе «подложка–фуллерит C₆₀» моделировались следующие температуры: 300, 700, 1150 К.

Моделирование велось с шагом по времени $\Delta t = 1$ фс.

Во всех проведенных компьютерных экспериментах продолжительность моделируемого процесса $t_m = 30$ пс.

Описание метода молекулярной динамики и потенциалов взаимодействия между исследуемыми элементами приведено в работах [20–25, 28].

Суть метода молекулярной динамики состоит в том, что для моделирования поведения многоатомной молекулярной системы используется классическое уравнение движения, имеющее вид [20]

$$m_i \frac{d^2 \mathbf{r}_i(t)}{dt^2} = \mathbf{F}_i, \quad 1 \leq i \leq N, \quad (1)$$

где i – номер атома; N – полное число атомов в системе; m_i – масса атома; \mathbf{r}_i – радиус-вектор атома; \mathbf{F}_i – равнодействующая сил, действующих на атом.

Равнодействующая сила определяется как

$$\mathbf{F}_i = \frac{\partial U(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N)}{\partial \mathbf{r}_i} + \mathbf{F}_i^{ex}, \quad (2)$$

где U – потенциальная энергия системы; \mathbf{F}_i^{ex} – сила, определяемая взаимодействиями с молекулами среды [20].

Потенциал энергии системы представляет собой совокупность потенциалов различных видов взаимодействия [21]:

$$U(r) = U_b + U_\theta + U_\varphi + U_{VW} + U_{qq}, \quad (3)$$

где U_b – потенциал изменения длины связи; U_θ – потенциал изменения угла между связями; U_φ – потенциал изменения торсионного угла и плоских групп; U_{VW} – потенциал Ван-дер-Ваальсового взаимодействия; U_{qq} – потенциал электростатического взаимодействия.

Математическая форма записи приведенных потенциалов приведена в работах [22–25, 28].

Потенциал химических связей определяется изменением длины связи между атомами (рис. 2). Вот некоторые из форм записи данного потенциала:

$$U_b = \sum_b D_b (\rho_{ij} - \rho_0)^2, \quad (4)$$

$$\begin{cases} U_b = \sum_b D_b (\rho_{ij} - \rho_0)^2, & |\rho_{ij} - \rho_0| \leq \rho_c, \\ U_b = \sum_b D_b \rho_c^2 + D_{rh} \rho_c (|\rho_{ij} - \rho_0| - \rho_c), & |\rho_{ij} - \rho_0| > \rho_c, \end{cases} \quad (5)$$

где b – количество химических связей; D_b, D_{rh} – константы; ρ_0 – значение равновесной длины связи; ρ_{ij} – значение текущей длины связи; ρ_c – значение критической длины связи.

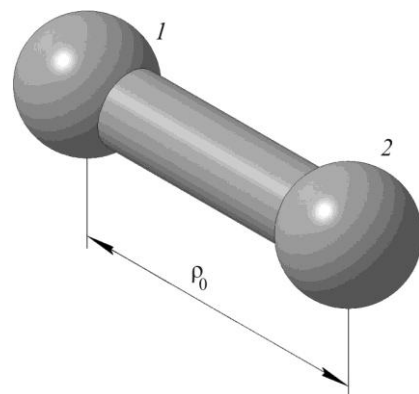


Рис. 2. Длина связи между атомами 1 и 2 в равновесном состоянии

Fig. 2. The bond length between atoms 1 and 2 in equilibrium

Потенциал валентного угла характеризуется изменением угла между связями атомов (рис. 3) и определяется соотношением, аналогичным (4):

$$U_b = \sum_a D_\theta (\theta - \theta_0)^2, \quad (6)$$

где a – количество валентных углов; D_θ – константа; θ_0 – значение равновесного валентного угла; θ_{ij} – значение текущего валентного угла.

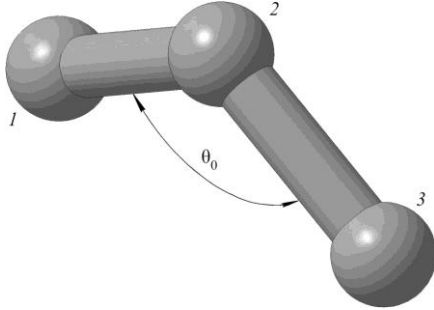


Рис. 3. Угол между связями атомов 1, 2 и 3 в равновесном состоянии

Fig. 3. The angle between the bonds of atoms 1, 2 and 3 in equilibrium

Потенциал изменения торсионного угла и плоских групп, изображенного на рис. 4, имеет вид

$$U_b = \sum_d \begin{cases} D_\varphi (\cos(n\varphi - \varphi_0) + 1), & n \neq 0, \\ D_\varphi (\varphi - \delta)^2, & n = 0, \end{cases} \quad (7)$$

где d – число двугранных углов; D_φ – константа, определяющая высоту потенциальных барьеров двугранных углов φ ; φ_0 – сдвиг фазы; n – кратность торсионного барьера.

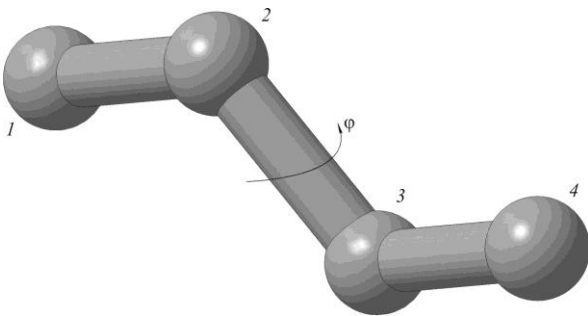


Рис. 4. Изменение торсионного угла φ между атомами 1, 2, 3 и 4

Fig. 4. Change in the torsion angle φ between atoms 1, 2, 3 and 4

Вандерваальсовы взаимодействия атомов описываются с помощью потенциалов Леннарда–Джонса:

$$U_{vw} = 4\zeta (r_{ij}^{-12} - r_{ij}^{-6}), \quad (8)$$

где ζ – глубина потенциальной ямы; $r_{ij} = R_{ij} / \rho_0$ – приведенное межатомное расстояние; R_{ij} – вектор, соединяющий центры атомов i и j .

Электростатическое взаимодействие определяется кулоновским потенциалом:

$$U_{qq} = \sum_N q_i \cdot q_j / e \cdot r_{ij}, \quad (9)$$

где q_i, q_j – парциальные заряды атомов; e – диэлектрическая проницаемость среды.

При моделировании использовались следующие потенциалы: изменения длины связи (4), изменения угла между связями (6), изменения торсионного угла и плоских групп (7). Взаимодействие между атомами кристаллической решетки железа описывалось Вандерваальсовым взаимодействием (8). Связи между атомами углерода и атомами железа не устанавливаются, а взаимодействие «железо–углерод» описывалось потенциалом в форме Леннарда–Джонса (8).

Осаждением фуллерена C_{60} на подложке железа считается наличие контакта между фуллереном и подложкой к 30 пс, т.е. к моменту окончания компьютерного эксперимента.

Для реализации компьютерных экспериментов по исследованию взаимодействия фуллерита C_{60} с подложкой твердого тела в соответствии с описанным выше методом молекулярной динамики использовался программный комплекс LAMMPS [29–32]. Программный комплекс LAMMPS используется для моделирования различных процессов на молекулярно-динамическом уровне [33–36]. При моделировании процесса в LAMMPS использовалось силовое поле CHARMM [37] (Chemistry at HARvard Macromolecular Mechanics), значение констант потенциалов, определяемое полем CHARMM, также содержится в этом программном комплексе.

2. Результаты расчетов системы «подложка железа – фуллерит C_{60} »

Результаты моделирования процессов взаимодействия фуллерита C_{60} с подложкой железа приведены в табл. 1. Из табл. 1 следует, что в компьютерных экспериментах наблюдалось как осаждение всех фуллеренов C_{60} , контактировавших с подложкой, так и частичное их осаждение, в одном из случаев ни один из фуллеренов C_{60} , образовавших фуллерит, не осел на подложке.

На рис. 5 показаны результаты осаждения фуллерита C_{60} на подложку на 30 пс.

В случаях ориентации фуллерита C_{60} гранью относительно подложки собственно грань фуллерита контактирующую с подложкой железа Fe (100) назовем первым слоем. Для однозначности описания поведения фуллеренов первого слоя фуллерита C_{60} , осевших на контактной поверхности подложки, пронумеруем их, как показано на рис. 6.

При соударении фуллерита C_{60} , ориентированного гранью относительно подложки, на скоростях $\bar{v} = 0,005 \dots 0,01 \text{ \AA/фс}$ все фуллерены первого слоя оседают на подложке.

Количество фуллеренов осевших на кристалле железа после соударения

Table 1

The number of fullerenes deposited on the iron crystal after the collision

Скорость фуллерита \bar{v} , Å/фс		0,005			0,01			0,02		
Температура системы подложка и фуллерит C ₆₀ , К		300	700	1150	300	700	1150	300	700	1150
Ориентация фуллерита C ₆₀ относительно кристалла железа	грань	5	5	5	5	5	5	4	2	1
	ребро	2	2	2	2	2	2	2	1	1
	вершина	1	1	1	1	1	1	1	1	–

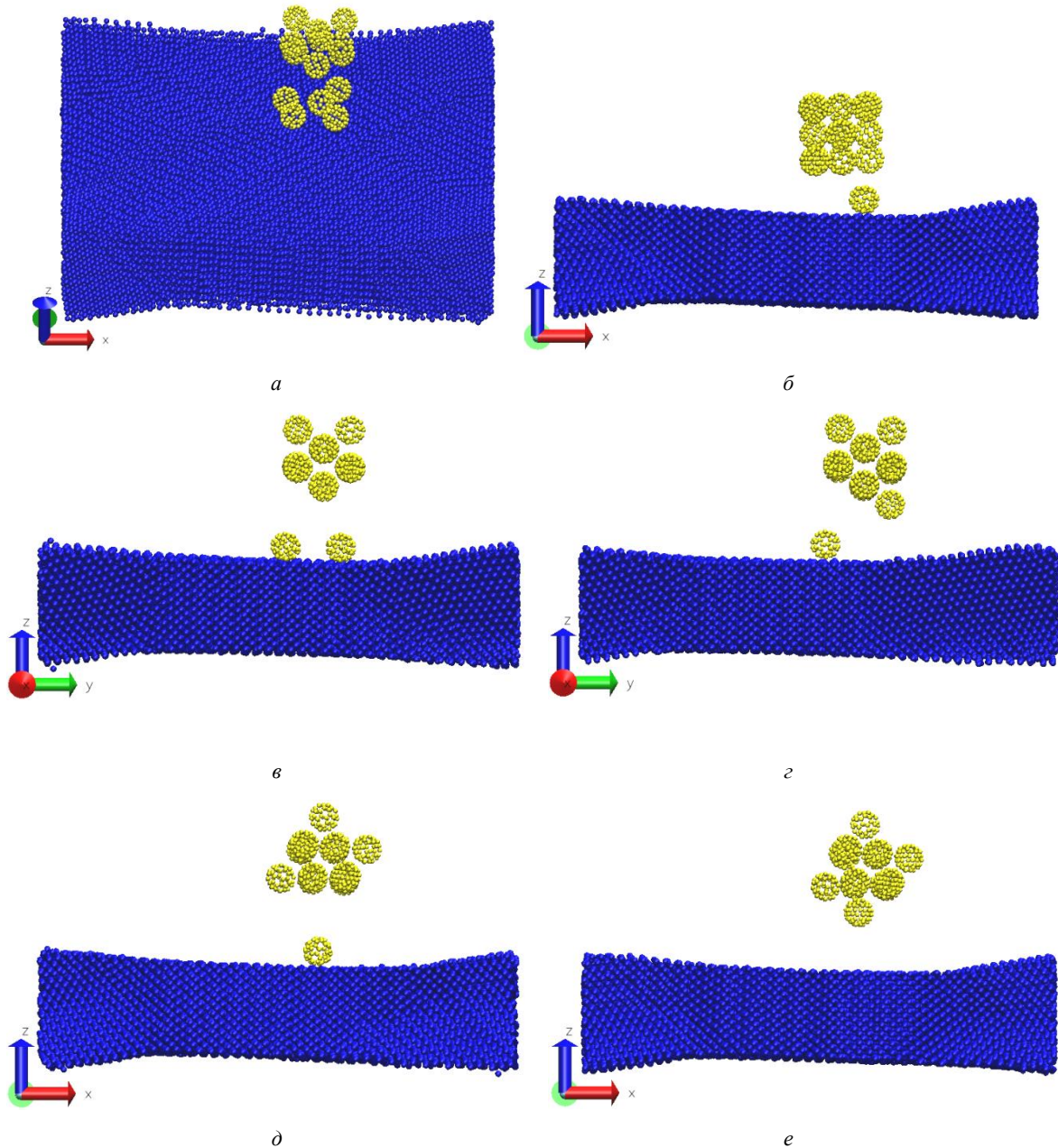


Рис. 5. Осаждение фуллерита C₆₀ с подложкой железа: *a* – грань, $\bar{v} = 0,01$ Å/фс, $T = 1150$ К; *б* – грань, $\bar{v} = 0,02$ Å/фс, $T = 1150$ К; *в* – ребро, $\bar{v} = 0,01$ Å/фс, $T = 1150$ К; *г* – ребро, $\bar{v} = 0,02$ Å/фс, $T = 1150$ К; *д* – вершина, $\bar{v} = 0,01$ Å/фс, $T = 1150$ К; *е* – вершина, $\bar{v} = 0,02$ Å/фс, $T = 1150$ К

Fig. 5. Deposition of fullerite C₆₀ with an iron substrate: *a* – face, $\bar{v} = 0.01$ Å/fs, $T = 1150$ K; *b* – face, $\bar{v} = 0.02$ Å/fs, $T = 1150$ K; *c* – edge, $\bar{v} = 0.01$ Å/fs, $T = 1150$ K; *d* – edge, $\bar{v} = 0.02$ Å/fs, $T = 1150$ K; *e* – top, $\bar{v} = 0.01$ Å/fs, $T = 1150$ K; *f* – top, $\bar{v} = 0.02$ Å/fs, $T = 1150$ K

Приведенные результаты компьютерного эксперимента коррелируют с результатами натурного эксперимента, приведенного в работе [38], где исследовался процесс адсорбции нейтральных молекул фуллеренов при температуре 600–650 К, с кинетической энергией 0,01–3 эВ, на поверхности различных твердых тел (Al, Ni, Si, MgO, SrTiO₃). Результатом эксперимента [38] является получение пленки C₆₀ диаметром около 7 мм.

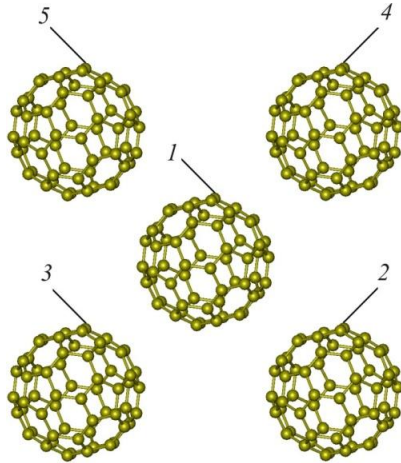


Рис. 6. Нумерация фуллеренов первого слоя фуллерита C₆₀

Fig. 6. Numbering of fullerenes of the first layer of fullerite C₆₀

При скорости фуллерита C₆₀, равной 0,02 Å/фс, и кинетической энергии фуллеренов, входящих в его состав, равной 14,94 эВ, с увеличением температуры от 300 до 1150 К число осевших на кристалле железа фуллеренов уменьшается. Столь резкое изменение в поведении фуллеренов после контакта с подложкой железа может отражать факт превышения предела кинетической энергии фуллеренов, при котором взаимодействие «железо – углерод» может быть описано потенциалом в форме Леннарда–Джонса, что требует дополнительных исследований.

В табл. 2 показаны максимальные изменения расстояний от первоначальных, в процентах, между центральным фуллереном 1 и периферийными 2–5, при различных условиях. Расстояние между фуллеренами измерялось как расстояние между центрами масс фуллеренов. Отрицательное значение изменения в табл. 2 означает, что расстояние между центральным фуллереном и периферийным уменьшилось, а положительное значение изменения означает, что расстояние увеличилось. На рис. 7 представлен график изменения расстояния между центральным фуллереном в осевшей на подложке грани и периферийными в зависимости от времени.

Из графика на рис. 7 следует, что до удара фуллерита C₆₀ о подложку расстояние между фуллеренами первого слоя квазилинейно уменьшается на величину порядка 1,5 %. После соударения изменение расстояний между центральным и периферийными фуллеренами первого слоя носит разнонаправленный характер, одна-

ко с течением времени амплитуды изменений расстояний уменьшаются, и к 30 пс наступает квазистационарное состояние.

Таблица 2

Изменения расстояний между центральным и периферийными фуллеренами 1-го слоя

Table 2

Changes in the distance between the central and peripheral fullerenes of the 1-st layer

Скорость фуллерита \bar{v} , Å/фс		0,005			0,01		
Температура системы подложка и фуллерит C ₆₀ , К		300	700	1150	300	700	1150
Изменение расстояния между центральным фуллереном 1 и периферийными 2, 3, 4, 5, %	1–2	-4,45 6,82	-4,57 4,45	-7,02 8,15	-5,88 9,51	-5,88 9,51	-4,44 7,05
	1–3	-5,85 3,92	-5,12 4,67	-4,56 7,43	-5,61 6,94	-5,61 6,94	-3,73 3,49
	1–4	-4,59 4,68	-5,21 10,77	-4,88 11,90	-5,05 11,02	-5,05 11,02	-5,54 2,58
	1–5	-3,17 3,89	-4,59 9,96	-3,70 3,76	-5,19 5,49	-5,19 5,49	-4,60 14,72

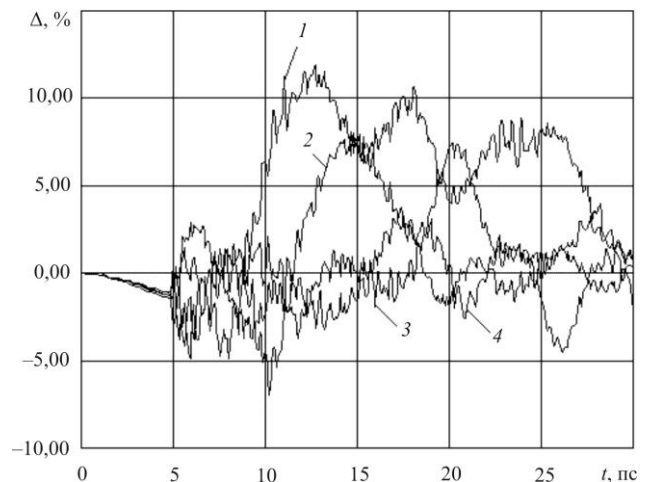


Рис. 7. Изменение расстояния между центральным фуллереном и периферийными в плоскости xOy при T = 1150 К, $\bar{v} = 0,005$ Å/фс: (1) – 1 – 2; (2) – 1 – 3; (3) – 1 – 4; (4) – 1 – 5

Fig. 7. Change distance between central fullerene and peripheral in the xOy plane at T = 1150 К, $\bar{v} = 0,005$ Å/fs: (1) – 1 – 2; (2) – 1 – 3; (3) – 1 – 4; (4) – 1 – 5

Осаждение фуллеренов C₆₀, образующих фуллерит, наблюдается и в случае если фуллерит при соударении с подложкой был ориентирован к ней ребром. В табл. 3 показаны максимальные (уменьшение и увеличение) изменения от первоначального расстояния между фуллеренами ребра фуллерита при различных условиях. Содержание положительного и отрицательного значения изменения расстояния между фуллеренами аналогично приведенному в табл. 2. На рис. 8 и 9 представлены графики изменения расстояния между осевшими на подложке фуллеренами в зависимости от времени.

Изменения расстояния между фуллеренами грани

Table 3

Changes in the distance between the fullerenes of the face

Скорость фуллерита, Å/фс	0,005			0,01			0,02
Температура системы подложка и фуллерит C ₆₀ , К	300	700	1150	300	700	1150	300
Изменение расстояния между фуллереном грани, %	$\frac{-32,76}{0,00}$	$\frac{-31,53}{0,00}$	$\frac{-5,62}{11,16}$	$\frac{-33,28}{0,00}$	$\frac{-31,21}{0,00}$	$\frac{-7,38}{4,41}$	$\frac{-31,18}{5,95}$

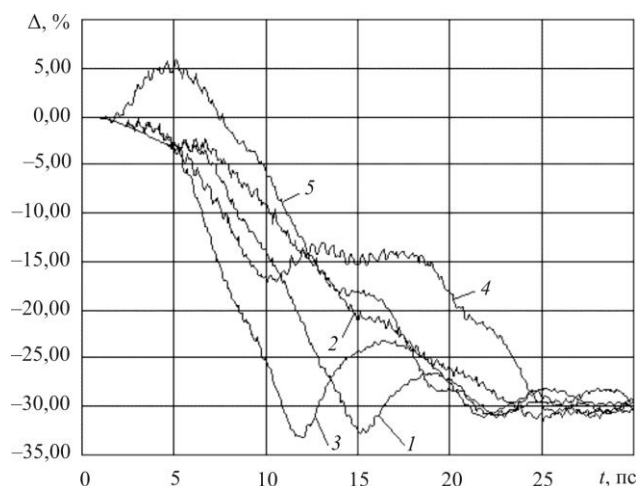


Рис. 8. Изменение расстояния между фуллеренами «ребра»: (1) $T = 300$ К, $\bar{v} = 0,005$ Å/фс; (2) $T = 700$ К, $\bar{v} = 0,005$ Å/фс; (3) $T = 300$ К, $\bar{v} = 0,01$ Å/фс; (4) $T = 700$ К, $\bar{v} = 0,01$ Å/фс; (5) $T = 300$ К, $\bar{v} = 0,02$ Å/фс

Fig. 8. Changing the distance between the fullerenes of «edge»: (1) $T = 300$ К, $\bar{v} = 0,005$ Å/фс; (2) $T = 700$ К, $\bar{v} = 0,005$ Å/фс; (3) $T = 300$ К, $\bar{v} = 0,01$ Å/фс; (4) $T = 700$ К, $\bar{v} = 0,01$ Å/фс; (5) $T = 300$ К, $\bar{v} = 0,02$ Å/фс

Из графиков на рис. 8 следует, что при температурах системы 300, 700 К расстояние между осевшими фуллеренами сокращается на 30 %. При этом если в интервале 5–15 пс изменение расстояния между фуллеренами может носить разнонаправленный характер, то к 25 пс наступает квазистационарный режим и расстояние между осевшими фуллеренами существенно не изменяется.

На рис. 9 представлены графики изменения расстояния между фуллеренами, осевшими на подложке при $T = 1150$ К. В обоих случаях первоначально наблюдается уменьшение расстояния между фуллеренами, а затем оно начинает увеличиваться и к 30 пс превышает расстояние между фуллеренами фуллерита C₆₀.

Проведенное моделирование позволило установить основные закономерности процесса взаимодействия фуллерита C₆₀ с подложкой твердого тела, которой являлся кристалл железа Fe(100).

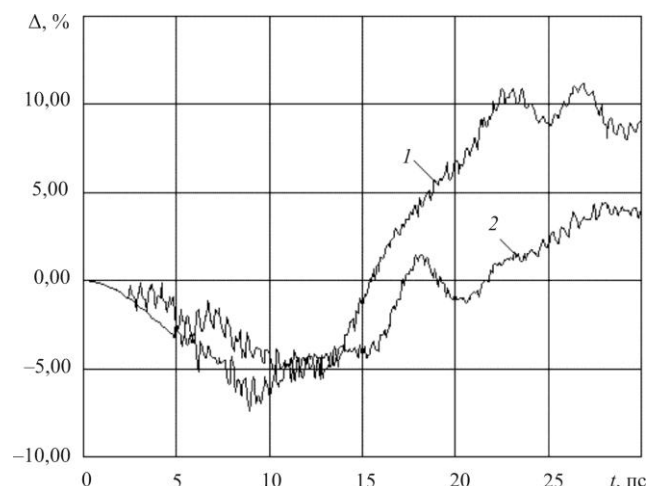


Рис. 9. Изменение расстояния между фуллеренами ребра при $T = 1150$ К: (1) $\bar{v} = 0,005$ Å/фс; (2) $\bar{v} = 0,01$ Å/фс

Fig. 9. The change in the distance between the fullerenes of the rib at $T = 1150$ К: (1) $\bar{v} = 0,005$ Å/фс; (2) $\bar{v} = 0,01$ Å/фс

Выводы

1. С увеличением скорости фуллерита C₆₀ относительно подложки твердого тела количество фуллеренов, осаждающихся на подложке, уменьшается.

2. При ориентации фуллерита C₆₀ гранью относительно кристалла железа расстояние между осевшими фуллеренами (центральный – периферийные) изменяется в пределах от –8 до 15 %.

3. При соударении фуллерита C₆₀ ребром о подложку при температурах системы 300, 700 К расстояние между осевшими фуллеренами сокращается на 30 %, и с 25 пс фуллерены C₆₀, осевшие на подложке железа, занимают квазистационарное положение, а при температуре 1150 К наблюдается увеличение расстояния между осевшими фуллеренами.

4. Контакт фуллерита C₆₀ вершиной о подложку приводит к осаждению фуллерена, находящегося в вершине фуллерита, во всех диапазонах моделируемых условий, кроме случая с параметрами взаимодействия $\bar{v} = 0,02$ Å/фс, $T = 1150$ К.

Библиографический список

1. Ruoff R.S., Ruoff A.L. Is C_{60} stiffer than diamond // Nature. – 1991. – Vol. 350 – P. 663–664.
2. Ultrahard and superhard phases of fullerite C_{60} : comparison with diamond on hardness and wear / V. Blank, M. Popov, G. Pivovarov, N. Lvova, K. Gogolinsky, V. Reshetov // Diamond and Related Materials. – 1998. – Vol. 7. – No. 2–5. – P. 427–431. DOI: 10.1016/S0925-9635(97)00232-X
3. Кравчук А.С., Трубиенко О.О. Модели и численное решение некоторых динамических контактных задач наномеханики // Вестн. Перм. гос. техн. ун-та. Математическое моделирование систем и процессов. – 2010. – № 1. – С. 72–79.
4. Лурье С.А., Соляев Ю.О. Модифицированный метод Эшелби в задаче определения эффективных свойств со сферическими микро- и нановключениями // Вестн. Перм. гос. техн. ун-та. Математическое моделирование систем и процессов. – 2010. – № 1. – С. 80–90.
5. Coarse-grained potential models for phenyl-based molecules: II. Application to fullerenes / C. Chiu, R. DeVane, M.L. Klein, W. Shinoda, P.B. Moore, S.O. Nielsen // J. Phys. Chem. B. – 2010. – Vol. 114. – No. 2. – P. 6394–6400.
6. Баран Л.В. Эволюция структуры фуллеритовых пленок, конденсированных на различные подложки // Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. – 2010. – № 9. – С. 84–88.
7. Смирнов С.В., Смирнова Е.О., Голубкова И.А. Определение диаграмм деформационного упрочнения поверхностных слоев металлических материалов с использованием инструментария наномеханических испытательных комплексов // Вестник Пермского национального исследовательского политехнического университета. Механика. – 2011. – № 2. – С. 84–91.
8. Деформационная стабильность фуллерит/фуллеренов $C_{60/70}$ / Р.М. Никонова [и др.] // Химическая физика и мезоскопия. – 2011. – Т. 13, № 3. – С. 406–410.
9. Гаришин О.К., Лебедев С.Н. Оценка механических свойств матрицы вокруг частиц наполнителя в полимерных нанокompозитах с помощью атомно-силовой микроскопии // Вестник Пермского национального исследовательского политехнического университета. Механика. – 2011. – № 3. – С. 15–25.
10. Композит на основе диоксида циркония, модифицированного углеродными нанотрубками: структура и механические свойства / Е.А. Ляпунова, М.В. Григорьев, А.П. Скачков, О.Б. Наймарк, С.Н. Кульков // Вестник Пермского национального исследовательского политехнического университета. Механика. – 2015. – № 4. – С. 308–316. DOI: 10.15593/perm.mech/2015.4.18
11. Об учете масштабных эффектов при моделировании механических и трибологических свойств двухфазных микро- и наномодифицированных полимерных покрытий / В.М. Бузник, С.А. Лурье, Д.Б. Волков-Богородский, А.Г. Князева, Ю.О. Соляев, Е.И. Попова // Вестник Пермского национального исследовательского политехнического университета. Механика. – 2015. – № 4. – С. 36–54. DOI: 10.15593/perm.mech/2015.4.03
12. Mahmoud Nasrollahzadeh, S. Mohammand Sajadi Chapter 1 – an introduction to nanotechnology // Interface science and Technology. – 2019. – Vol. 28. – P. 1–27.
13. M. Mohan Gokhale, R. Ravindra Somani Fullerenes: chemistry and its applications // Mini Rev Org Chem. – 2015. – Vol.12. – P. 355–366.
14. Depth profiling by cluster projectiles as seen by computer simulations / Z. Postawa, L. Rzeznik, R. Paruch, M.F. Russo, N. Winogradb, B.J. Garrison // Surf. Interface Anal. – 2011. – Vol. 43. – No. 12. – P. 12–15. DOI: 10.1002/sia.3417
15. Вахрушев А.В., Суворов С.В. Моделирование процесса внедрения фуллерена C_{60} в поверхность твердого тела // Химическая физика и мезоскопия. – 2011. – Т. 13, № 4. – С. 478–482.
16. Вахрушев А.В., Суворов С.В., Северюхин А.В. Моделирование поведения фуллеренового кластера на поверхности твердого тела // Химическая физика и мезоскопия. – 2013. – Т. 15, № 4. – С. 515–522.
17. Елецкий А.В., Смирнов Б.М. Фуллерены и структуры углерода // Успехи физических наук. – 1995. – Т. 165, № 9. – С. 977–1009.
18. Rysaeva L.Kh. Mechanical properties of fullerite of various composition // IOP Conf. Series: Journal of physics: Conf. Series. – 2017. – Vol. 938. – P. 1–7.
19. Киттель Ч. Введение в физику твердого тела. – М.: Наука, 1978. – 789 с.
20. Шайтан К.В., Терешкина К.Б. Молекулярная динамика белков и пептидов. – М.: Ойкос, 2004. – 103 с.
21. Разработка и исследование аэрозольных нанотехнологий / В.Н. Аликин [и др.]. – М.: Машиностроение, 2010. – 196 с.
22. Кантор Ч., Шиммель П. Биофизическая химия: в 3 т.: пер. с англ. – М.: Мир, 1984. – Т. 1 – 336 с.
23. Anderson H.S. Molecular dynamics simulation at constant pressure and/or temperature // J. Chem. Phys. – 1980. – Vol. 72 – P. 2384–2396.
24. Frenkel D., Smit B., Understanding molecular simulation: from algorithms to applications – San Diego: Academic Press, 2002. – 638 p.
25. Haile M.J. Molecular Dynamics Simulation – Elementary Methods – N.Y.: Wiley-Interscience, 1992. – 386 p.
26. Bozdaganyan Marine E., Orekhov Philipp S., Shaytan Alexey K. Comparative computation study of interaction of C_{60} fullerene and tris-malonyl- C_{60} -fullerene isomers with lipid bilayer: relation to their antioxidant effect // J. Plus One. – Vol. 9. – Iss. 7. – P. 1–8.
27. Chun Wang, Chi C. Hua, Show A. Chen dynamic solvation shell and solubility of C_{60} in organic solvents // J. Phys. Chem. B. – 2014. – Vol. 118. – P. 9964–9973.
28. Nose S. A molecular dynamics methods for simulation in the canonical ensemble // Mol. Phys. – 1984. – Vol. 52. – P. 255–278.
29. Plimpton S. Fast Parallel Algorithms for Short-Range Molecular Dynamics // J. Comp. Phys. – 1995. – Vol. 117. – P. 1–19.
30. Parallel reactive molecular dynamics: Numerical methods and algorithmic techniques / H.M. Aktulga, J.C. Fogarty, S.A. Pandit, A.Y. Grama // Parallel Computing. – 2012. – Vol. 38. – No. 4. – P. 245–259. DOI: 10.1016/j.parco.2011.08.005
31. Large-Scale, Long-Term Nonadiabatic Electron Molecular Dynamics for Describing Material Properties and Phenomena in Extreme Environments / A. Jaramillo-Botero, J. Su, A. Qi, W.A. Goddard III // J. Comp. Chem. – 2012. – Vol. 32. – No. 3. – P. 497–512. DOI: 10.1002/jcc.21637
32. Mesoscale Hydrodynamics via Stochastic Rotation Dynamics: Comparison with Lennard-Jones Fluid / M.K. Petersen, J.B. Lechman, S.J. Plimpton, G.S. Grest, P.J. in't Veld, P.R. Schunk // J. Chem. Phys. – 2010. – Vol. 132. – No. 17. – P. 174106. DOI: 10.1063/1.3419070
33. An enhanced entangled polymer model for dissipative particle dynamics / T. Sirk, Y. Sliozberg, J. Brennan, M. Lisal, J. Andzelm // J. Phys. Chem. – 2012. – Vol. 136. – No. 13. – P. 134903. DOI: 10.1063/1.3698476

34. Sirk T.W., Moore S., Brown E.F. Characteristics of thermal conductivity in classical water models // *J. Phys. Chem.* – 2013. – Vol. 138. – No. 6. – P. 064505. DOI: 10.1063/1.4789961
35. Plimpton S.J., Thompson A.P. Computational Aspects of Many-body Potentials // *MRS Bulletin.* – 2012. – Vol. 37. – No. 5. – P. 513–521. DOI: 10.1557/mrs.2012.96
36. Kong L.T. Phonon dispersion measured directly from molecular dynamics simulations // *Comp. Phys. Comm.* – 2011. – Vol. 182. – P. 2201–2207.

References

1. Ruoff R.S., Ruoff A.L. Is C_{60} stiffer than diamond. *Nature.*, 1991, vol. 350, pp. 663-664.
2. Blank V., Popov M., Pivovarov G., Lvova N., Gogolinsky K., Reshetov V. Ultrahard and superhard phases of fullerite C_{60} : comparison with diamond on hardness and wear. *Diamond and Related Materials.*, 1998, 7(2-5), pp. 427-431. DOI: 10.1016/S0925-9635(97)00232-X
3. Kravchuk A.S., Trubienko O.O. Modeli i chislennoe reshenie nekotorykh dinamicheskikh kontaknykh zadach nanomekhaniki [Models and numerical solution of some dynamic contact problems of nanomechanics]. *PGTU Bulletin. Mathematical modeling of systems and processes*, 2010, no.1, pp. 72-79.
4. Lur'e S.A., Soliaev Iu.O. Modifitsirovannyi metod Eshelbi v zadache opredeleniia effektivnykh svoistv so sfericheskimi mikro- i nanovkliucheniiami [The modified Eshelby method in the problem of determining effective properties with spherical micro and nano-inclusions]. *PGTU Bulletin. Mathematical modeling of systems and processes*, 2010, no.1, pp. 80-90.
5. Chiu C., DeVane R., Klein M.L., Shinoda W., Moore P.B., Nielsen S.O. Coarse-grained potential models for phenyl-based molecules: II. Application to fullerenes. *J. Phys. Chem. B.*, 2010, 114(2), pp. 6394-6400.
6. Baran L.V. Evoliutsiia struktury fulleritovykh plenok, kondensirovannykh na razlichnye podlozki [Evolution of the structure of fullerite membrane condensed on various substrates]. *Poverkhnost'. Rentgenovskie, sinkhrotronnye i neitronnye issledovaniia*, 2010, no. 9, pp. 84-88.
7. Smirnov S.V., Smirnova E.O., Golubkova I.A. Determination of strain hardening diagrams of surface layers of metallic materials using the tools of nanomechanical test complexes. *PNRPU Mechanics Bulletin*, 2011, no. 2, pp. 84-91.
8. Nikonova R.M., Lad'ianov V.I., Aksenov V.V., Pozdeeva N.S., Dorofeev G.A. Deformatsionnaia stabil'nost' fullerit/fullerenov $C_{60/70}$ [Deformational stability of fullerite/fullerenes $C_{60/70}$]. *Khimicheskaiia fizika i mezoskopiiia*, 2011, vol. 13, no 3, pp. 406-410.
9. Garishin O.K., Lebedev S.N. Evaluation of the mechanical properties of the matrix around the filler particles in polymer nanocomposites using atomic force microscopy. *PNRPU Mechanics Bulletin*, 2011, no. 3, pp. 15-25.
10. Lyapunova E.A., Grigoriev M.V., Skachkov A.P., Naimark O.B., Kulikov S.N. Structure and mechanical properties of zirconium oxide modified with carbon nanotubes. *PNRPU Mechanics Bulletin*, 2015, no. 4, pp. 308-316. DOI: 10.15593/perm.mech/2015.4.18
11. Buznik V.M., Lurie S.A., Volkov-Bogorodskiy D.B., Knyazeva A.G., Solyaev Yu.O., Popova E.I. On account of scale effects in the mechanical and tribological properties of two-phase micro- and nanomodified polymer coatings. *PNRPU Mechanics Bulletin*, 2015, no. 4, pp. 36-54. DOI: 10.15593/perm.inech/2015.4.03
12. Mahmoud Nasrollahzadeh, S. Mohammand Sajadi Chapter 1 – an introduction to nanotechnology. *Interface science and technology*, 2019, v.28, pp. 1-27.

37. Brooks B.R., Bruccoleri R.E., Olafson B.D. CHARMM: A program for macromolecular energy, minimization, and dynamics calculations // *J. Comp. Chem.* – 1983. – Vol. 4. – P. 187–217.
38. Исследование свойств пленок фуллеренов, осажденных с высокой кинетической энергией, на различных поверхностях / М.А. Ходорковский, С.В. Мурашов, А.Л. Шахмин, Т.О. Артамонова, Л.П. Ракчеева, А.С. Мельников // *Журнал технической физики.* – 2006. – Т. 76, № 7. – С. 140–142.

13. M. Mohan Gokhale, R. Ravindra Somani Fullerenes: chemistry and its applications. *Mini Rev Org Chem*, 2015, v.12, pp. 355-366.
14. Postawa Z., Rzeznik L., Paruch R., Russo M.F., Wino-gradb N., Garrison B.J. Depth profiling by cluster projectiles as seen by computer simulations. *Surf. Interface Anal.*, 2011, 43(12), pp. 12-15. DOI: 10.1002/sia.3417
15. Vakhrushev A.V., Suvorov S.V. Modelirovanie protsessa vnedreniia fullerena C_{60} v poverkhnost' tverdogo tela [Modeling the process of introducing fullerene C_{60} into the surface of a solid]. *Khimicheskaiia fizika i mezoskopiiia – Chemical Physics and Mesoscopy*, 2011, vol. 13, no. 4, pp. 478-482.
16. Vakhrushev A.V., Suvorov S.V., Severiuchin A.V. Modelirovanie povedeniia fullerenovogo klastera na poverkhnosti tverdogo tela [Modeling the behavior of a fullerene cluster on a solid surface]. *Khimicheskaiia fizika i mezoskopiiia*, 2013, vol. 15, no. 4, pp. 515-522.
17. Eletskii A.V., Smirnov B.M. Fullereny i struktury ugle-roda [Fullerenes and carbon structures]. *Uspekhi fizicheskikh nauk*, 1995, vol. 165, no. 9, pp. 977-1009.
18. L. Kh. Rysaeva Mechanical properties of fullerite of various composition. *IOP Conf. Series: Journal of physics: Conf. Series*, 2017, 938, pp.1-7.
19. Kittel' Ch. Vvedenie v fiziku tverdogo tela [Introduction to Solid State Physics]. *Moscow, Nauka*, 1978, 789 p.
20. Shaitan K.V., Tereshkina K.B. Molekuliarnaia dinamika belkov i peptidov [Molecular dynamics of proteins and peptides]. *Moscow, Oikos*, 2004, 103 p.
21. Alikin V.N., Vakhrushev A.V., et al. Razrabotka i isledovanie aerazol'nykh nanotekhnologii [Development and research of aerosol nanotechnology]. *Moscow, Mashinostroenie*, 2010, 196 p.
22. Cantor C.R., Schimmel P.R. Biophysical chemistry. *San Francisco, W.H. Freeman and Company*, 1980, 365 p.
23. Anderson H.S. Molecular dynamics simulation at constant pressure and/or temperature. *J. Chem. Phys.*, 1980, vol. 72, pp. 2384–2396.
24. Frenkel D., Smit B., Understanding molecular simulation: from algorithms to applications. *San Diego, Academic Press*, 2002, 638 p.
25. Haile M.J. Molecular Dynamics Simulation – Elementary Methods. *New York, Wiley Interscience*, 1992, 386 p.
26. Marine E. Bozdaganyan, Philipp S. Orekhov, Alexey K. Shaytan Comparative computation study of interaction of C_{60} fullerene and tris-malonyl- C_{60} -fullerene isomers with lipid bilayer: relation to their antioxidant effect. *J. Plus one*, v. 9, i. 7, pp. 1-8.
27. ChunI Wang, Chi C. Hua, Show A. Chen dynamic solvation shell and solubility of C_{60} in organic solvents. *J. Phys. Chem. B*, 2014, vol. 118, pp. 9964-9973
28. Nose S. A molecular dynamics methods for simulation in the canonical ensemble. *Mol. Phys.*, 1984, vol. 52, pp. 255-278.

29. Plimpton S. Fast Parallel Algorithms for Short-Range Molecular Dynamics. *J. Comp. Phys.*, 1995, vol. 117, pp. 1-19.
30. Aktulga H.M., Fogarty J.C., Pandit S.A., Grama A.Y. Parallel reactive molecular dynamics: Numerical methods and algorithmic techniques. *Parallel Computing*, 2012, 38 (4), pp. 245-259. DOI: 10.1016/j.parco.2011.08.005
31. Jaramillo-Botero A., Su J., Qi A., Goddard III W.A. Large-Scale, Long-Term Nonadiabatic Electron Molecular Dynamics for Describing Material Properties and Phenomena in Extreme Environments. *J. Comp. Chem.*, 2012, 32 (3), pp. 497-512. DOI: 10.1002/jcc.21637
32. Petersen M.K., Lechman J.B., Plimpton S.J., Grest G.S., in't Veld P.J., Schunk P.R. Mesoscale Hydrodynamics via Stochastic Rotation Dynamics: Comparison with Lennard-Jones Fluid. *J. Chem. Phys.*, 2010, 132 (17), pp. 174106. DOI: 10.1063/1.3419070
33. Sirk T., Slizberg Y., Brennan J., Lisal M., Andzelm J. An enhanced entangled polymer model for dissipative particle dynamics. *J. Phys. Chem.*, 2012, 136 (13), pp. 134903. DOI: 10.1063/1.3698476
34. Sirk T.W., Moore S., Brown E.F. Characteristics of thermal conductivity in classical water models. *J. Phys. Chem.*, 2013, 138 (6), pp. 064505. DOI: 10.1063/1.4789961
35. Plimpton S.J., Thompson A.P., Computational Aspects of Many-body Potentials. *MRS Bulletin*, 2012, 37 (5), pp. 513-521. DOI: 10.1557/mrs.2012.96
36. Kong L.T. Phonon dispersion measured directly from molecular dynamics simulations. *Comp Phys Comm.*, 2011, vol. 182, pp. 2201-2207.
37. Brooks, B.R. Bruccoleri R.E., Olafson B.D. CHARMM: A program for macromolecular energy, minimization, and dynamics calculations. *J. Comp. Chem.*, 1983, 4, pp. 187-217.
38. Khodorkovski M.A., Shakhmin A.L., Artamonova T.O., Rakcheeva L.P., Murashov S.V., Mel'nikov A.S. Properties of fullerene films obtained by high-kinetic-energy deposition on various surfaces. *Technical Physics. The Russian Journal of Applied Physics.*, 2006, 51 (7). pp. 959-961.