

Суворов С.В., Северюхин А.В., Вахрушев А.В. Влияние угла «встречи» фуллерита  $C_{60}$  с подложкой твердого тела на процесс осаждения // Вестник Пермского национального исследовательского политехнического университета. Механика. 2020. № 3. С. 90-97. DOI: 10.15593/perm.mech/2020.3.09

Suvorov S.V., Severiuchin A.V., Vakhrushev A.V. The effect of the angle of «meeting» of fullerite  $C_{60}$  with a solid substrate on the deposition process. *PNRPU Mechanics Bulletin*, 2020, no. 3, pp. 90-97. DOI: 10.15593/perm.mech/2020.3.09



ВЕСТНИК ПНИПУ. МЕХАНИКА

№ 3, 2020

PNRPU MECHANICS BULLETIN

<https://ered.pstu.ru/index.php/mechanics/index>



DOI: 10.15593/perm.mech/2020.3.09

УДК 519.622.2 : 539.231

## ВЛИЯНИЕ УГЛА «ВСТРЕЧИ» ФУЛЛЕРИТА $C_{60}$ С ПОДЛОЖКОЙ ТВЕРДОГО ТЕЛА НА ПРОЦЕСС ОСАЖДЕНИЯ

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

УдмФИЦ УрО РАН, Ижевск, Россия

### О СТАТЬЕ

Получена: 29 июня 2020 г.  
Принята: 24 сентября 2020 г.  
Опубликована: 09 ноября 2020 г.

#### Ключевые слова:

фуллерит, фуллерен, твердое тело, подложка, молекулярная динамика, температура, скорость, угол.

### АННОТАЦИЯ

Углерод образует большое количество аллотропных форм, одной из которых является фуллерен, представляющий собой выпуклый замкнутый многогранник, в вершинах которого находятся атомы углерода. Наиболее распространенным является фуллерен, состоящий из 60 атомов углерода и обозначаемый  $C_{60}$ . В свою очередь фуллерены способны агломерировать, образуя молекулярный кристалл – фуллерит. При взаимодействии фуллерита  $C_{60}$  с твердым телом возможно осаждение на поверхности тела как целого фуллерита, так и фуллеренов, его образующих.

Процесс взаимодействия в системе фуллерит  $C_{60}$  – подложка твердого тела, далее – система фуллерит – подложка, является многопараметрическим. Так, при моделировании взаимодействия фуллерита с подложкой учитывались: температура системы – 300, 700, 1150 К; скорость движения фуллерита – 0,005; 0,01; 0,02 Å/фс. Кроме того, в проведенном исследовании варьировался угол между вектором скорости фуллерита и нормалью к контактной поверхности подложки, называемый углом «встречи». В качестве подложки твердого тела моделировался кристалл железа Fe(100), как один из наиболее распространенных конструкционных материалов. Фуллерит  $C_{60}$  контактировал с подложкой твердого тела своей гранью. Компьютерное моделирование процесса контакта фуллерита  $C_{60}$  с подложкой было проведено в программном комплексе LAMMPS.

Основным результатом данного исследования является определение влияния угла «встречи» фуллерита  $C_{60}$  при контакте с подложкой твердого тела, что существенно дополнит общую картину процесса осаждения фуллеритов  $C_{60}$ . В свою очередь это может позволить создавать различные пленки и износостойкие покрытия на поверхности материалов.

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

Stepan V. Suvorov – CSc in Physics and Mathematics, Senior Researcher, e-mail: ssv.82@mail.ru,

ID: 0000-0003-3051-7732.

Alexander V. Severyuchin – CSc in Physical and Mathematical Sciences, Senior Researcher, e-mail: severfam@mail.ru,

ID: 0000-0002-9319-5681.

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

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)

## THE EFFECT OF THE ANGLE OF «MEETING» OF FULLERITE C<sub>60</sub> WITH A SOLID SUBSTRATE ON THE DEPOSITION PROCESS

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

UdmFRC UB RAS, Izhevsk, Russian Federation

### ARTICLE INFO

Received: 29 June 2020  
Accepted: 24 September 2020  
Published: 09 November 2020

#### Keywords:

fullerite, fullerene, solid, substrate, molecular dynamics, temperature, speed, angle.

### ABSTRACT

Carbon forms a large number of allotropic forms, one of which is fullerene. Fullerene is a convex closed polyhedron with carbon atoms at its vertices. The most common is fullerene, consisting of 60 carbon atoms and designated – C<sub>60</sub>. In turn, fullerenes are able to agglomerate, forming a molecular crystal – fullerite. In the interaction of fullerite C<sub>60</sub> with a solid, it is possible to deposit on the surface of the body both whole fullerite and the fullerenes that form it.

The interaction process in the C<sub>60</sub> fullerite system – the substrate of a solid, and then on – the fullerite – substrate system – is multi-parameter. So, when modeling the interaction of fullerite with a substrate, the following were taken into account: the temperature of the system – 300, 700, 1150 K; the speed of fullerite movement is 0.005, 0.01, 0.02 Å / fs. In addition, in the study, we varied the angle between the fullerite velocity vector and the normal to the contact surface of the substrate, called the “meeting angle”. An iron crystal Fe (100) was modeled as a solid body substrate, as one of the most common structural materials. Fullerite C<sub>60</sub> was in contact with the solid substrate with its face. Computer simulation of the process of contact of fullerite C<sub>60</sub> with the substrate was carried out in the LAMMPS software package.

The main result of this study is to determine the effect of the angle of “meeting” of C<sub>60</sub> fullerite in contact with a solid substrate, which will significantly complement the overall picture of the process of C<sub>60</sub> fullerite deposition. In turn, this can allow the creation of various films and wear-resistant coatings on the surface of materials.

© PNRPU

### Введение

Все более широкое практическое применение фуллеренов и фуллеритов в различных отраслях промышленности обуславливает и большой объем научных работ [1–14], посвященных этим соединениям.

При этом исследования, направленные на изучение фуллеренов и фуллеритов, ведутся не только посредством проведения натуральных экспериментов, но и с применением компьютерного моделирования, в том числе с использованием аппарата молекулярной динамики [15–17].

В статье [18] приведены результаты моделирования взаимодействия фуллерита C<sub>60</sub> с подложкой железа при различных условиях – температура, скорость движения фуллерита и ориентация фуллерита относительно подложки. Было рассмотрено три варианта положения фуллерита по отношению к подложке в момент их контакта, а именно – грань, ребро и вершина [18].

Благодаря исследованиям, приведенным в [18], были установлены основные закономерности процесса осаждения фуллерита на подложку железа Fe(100). Однако во всех компьютерных моделях [18] вектор скорости фуллерита был направлен по нормали к плоскости подложки.

В данной работе исследуется влияние угла «встречи» фуллерита C<sub>60</sub> с подложкой.

Следует отметить, что в приведенной работе, как и в работе [18], при моделировании процесса осаждения фуллерит имеет гранцентрированную кубическую (ГЦК) укладку молекул фуллеренов C<sub>60</sub>.

### 1. Постановка задачи

Условия моделируемого процесса соответствуют тем, что были приведены в статье [18]:

– подложкой твердого тела является кристалл железа Fe(100) с постоянной решетки 2,87 Å [19], а тип его кристаллической решетки – кубическая объемно-центрированная;

– постоянная кристаллической решетки фуллерита принята равной 1,4154 нм [14];

– при моделировании системы фуллерит C<sub>60</sub> – подложка задавались следующие значения температуры: 300, 700, 1150 K;

– фуллерит до контакта с подложкой имел постоянную скорость, ее значения – 0,005; 0,01; 0,02 Å/фс;

– расстояние вдоль оси Oz между контактной поверхностью подложки и нижней гранью (1-й слой) фуллерита C<sub>60</sub> составляет 11,5 Å;

– после соприкосновения фуллерена C<sub>60</sub> с подложкой скорость всех атомов системы определяется значением температуры системы.

Отличие от задачи, приведенной в [18], состоит в том, что вектор скорости фуллерита направлялся не по нормали к контактной поверхности подложки, а под углом. Угол «встречи» между фуллеритом и подложкой измерялся как угол между вектором скорости фуллерита и нормалью к контактной поверхности подложки (кристалла железа Fe(100)), причем вектор скорости и нормаль лежат в одной плоскости, что показано на рис. 1.

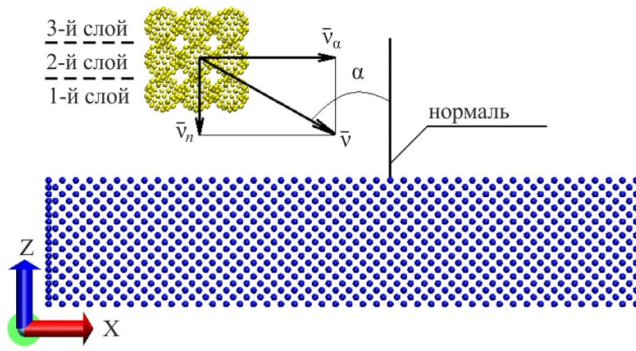


Рис. 1. Угол «встречи» между фуллеритом C<sub>60</sub> и подложкой

Fig. 1. The meeting angle of fullerite C<sub>60</sub> and the substrate

При исследовании устанавливались три угла «встречи» ( $\alpha$ ) фуллерита с подложкой – 15°, 45°, 75°.

Для удобства описания и анализа результатов взаимодействия фуллерита C<sub>60</sub> с подложкой введем понятия:

- нормальная составляющая скорости фуллерита ( $\bar{v}_n$ ) – проекция скорости фуллерита на нормаль к контактной грани подложки;
- тангенциальная составляющая скорости фуллерита ( $\bar{v}_\tau$ ) – проекция скорости фуллерита на плоскость, параллельную контактной грани подложки.

Числовые значения нормальных и тангенциальных составляющих скоростей фуллерита C<sub>60</sub> приведены в табл. 1.

Таблица 1

Значения нормальных и тангенциальных составляющих скоростей фуллерита C<sub>60</sub>

Table 1

Values of normal and tangential components of C<sub>60</sub> fullerite velocities

Показатели	Скорость фуллерита, Å/фс								
	0,005			0,01			0,02		
Угол «встречи» фуллерита C <sub>60</sub> с подложкой, град	15	45	75	15	45	75	15	45	75
Нормальная составляющая скорости фуллерита ( $\bar{v}_n$ ), Å/фс	0,0048	0,0035	0,0013	0,0097	0,007	0,0026	0,019	0,014	0,005
Тангенциальная составляющая скорости фуллерита ( $\bar{v}_\tau$ ), Å/фс	0,0013	0,0035	0,0048	0,0026	0,007	0,0097	0,005	0,014	0,019

Кинетическая энергия каждого отдельного фуллерена, образующего фуллерит, при скоростях 0,005; 0,01; 0,02 Å/фс соответственно составит: 0,93 эВ, 3,73 эВ, 14,94 эВ.

Состояние системы в начальный момент времени показано на рис. 2.

Фуллерит контактировал с поверхностью подложки гранью.

Продолжительность моделирования процесса взаимодействия фуллерита с подложкой составляла  $t_m = 60$  пс, с шагом по времени  $\Delta t = 1$  фс.

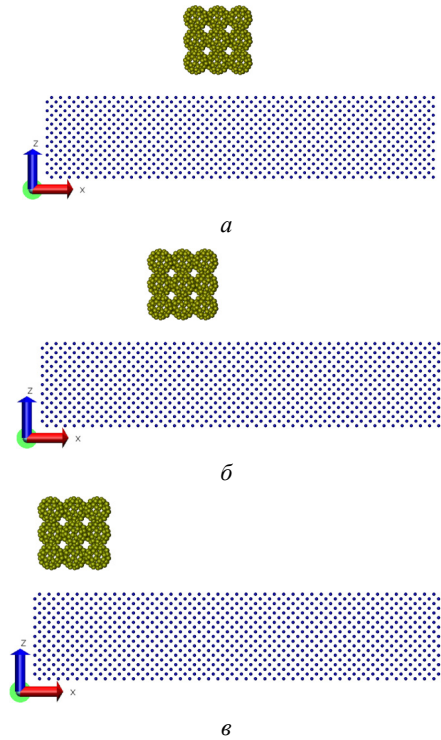


Рис. 2. Положение фуллерита C<sub>60</sub> и подложки железа в начальный момент времени: а – угол 15°; б – угол 45°; в – угол 75°

Fig. 2. The position of fullerite C<sub>60</sub> and the iron substrate at the initial time: a) the angle – is 15 degrees; b) the angle – is 45 degrees; c) the angle – is 75 degrees

Моделирование процесса осаждения фуллерита C<sub>60</sub> на подложку железа Fe(100) велось методом молекулярной динамики [20–26] в программном комплексе LAMMPS [27–35].

## 2. Результаты расчетов

Аналогично результатам, приведенным в статье [18], следует отметить, что до удара фуллерита C<sub>60</sub> о подложку железа Fe(100) расстояние между фуллеренами, образующими фуллерит, уменьшается.

Количество фуллеренов C<sub>60</sub>, осевших на подложке после удара об нее фуллерита, показано в табл. 2.

Приведенные в табл. 2 значения «14» и «14\*» характеризуют:

– «14» – после контакта с подложкой железа фуллерит C<sub>60</sub> осел полностью, и его структура осталась целостной.

– «14\*» – после контакта с подложкой железа фуллерит C<sub>60</sub> осел полностью, но его структура нарушена.

Из результатов, приведенных в табл. 2, следует, что с увеличением скорости фуллерита количество фуллеренов, осевших на подложку железа, уменьшается, а увеличение угла «встречи» ( $\alpha$ ) фуллерита с подложкой, напротив, приводит к увеличению количества осевших фуллеренов, и при определенных условиях наблюдается полное осаждение фуллерита на подложку. Влияние температуры на процесс осаждения фуллерита носит разнонаправленный характер.

Таблица 2  
Фуллерены C<sub>60</sub>, осевшие на подложку  
Table 2  
C<sub>60</sub> fullerenes deposited on the substrate

Показатели	Скорость фуллерита, Å/фс								
	0,005			0,01			0,02		
Температура системы подложка и фуллерит C <sub>60</sub> , К	300	700	1150	300	700	1150	300	700	1150
Угол «встречи» фуллерита C <sub>60</sub> с подложкой, град	15	5	5	5	5	5	5	5	3
	45	14	14*	14*	5	5	5	5	5
	75	14	14	14*	14*	14*	14*	–	1

Следует заметить, что при определенном сочетании угла «встречи» и скорости фуллерита происходит ricochetирование последнего, возможно, это объясняется большим значением  $\bar{v}_t$ .

На рис. 3 показаны результаты моделирования осаждения фуллерита на подложку железа при различных условиях.

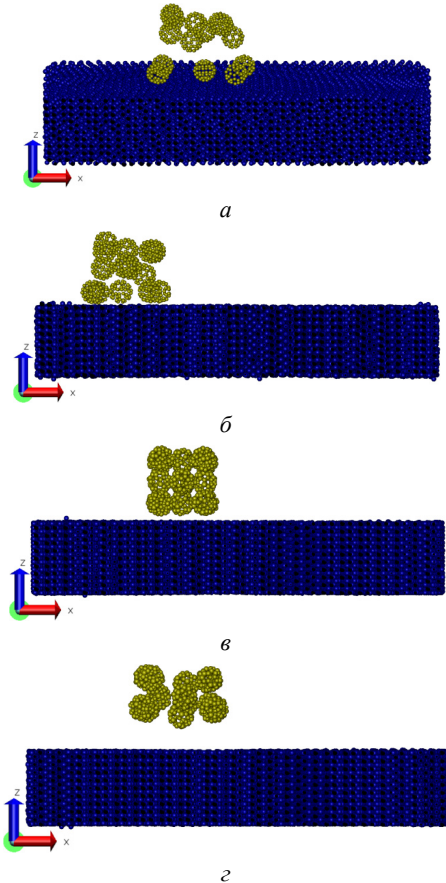


Рис. 3. Фуллерит C<sub>60</sub> после взаимодействия с подложкой железа: а – α = 15°,  $\bar{v} = 0,01$  Å/фс, T = 700 К; б – α = 45°,  $\bar{v} = 0,005$  Å/фс, T = 1150 К; в – α = 75°,  $\bar{v} = 0,005$  Å/фс, T = 300 К; г – α = 75°,  $\bar{v} = 0,02$  Å/фс, T = 300 К

Fig. 3. C<sub>60</sub> fullerite after interaction with the iron substrate: а – α = 15 degrees,  $\bar{v} = 0.01$  Å/fs, T = 700 K; б – α = 45 degrees,  $\bar{v} = 0.005$  Å/fs, T = 1150 K; в – α = 75 degrees,  $\bar{v} = 0.005$  Å/fs, T = 300 K; г – α = 75 degrees,  $\bar{v} = 0.02$  Å/fs, T = 300 K

Для удобства анализа результатов осаждения фуллерита C<sub>60</sub> на подложку условно разделим ее на три слоя, как показано на рис. 1, и проведем нумерацию фуллеренов (рис. 4).

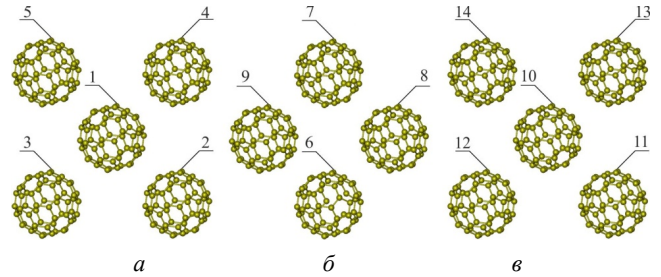


Рис. 4. Нумерация фуллеренов в фуллерите C<sub>60</sub>: а – 1-й слой; б – 2-й слой; в – 3-й слой

Fig. 4. Numbering of fullerenes in C<sub>60</sub> fullerite: а – 1 layer; б – 2 layer; в – 3 layer

Фуллерены с «1» по «5» образуют грань, контактирующую с подложкой.

Графическое представление поведения центра масс фуллеренов, осевших на подложке железа, показано на рис. 5–7, где изображены изменения расстояний в процентах от первоначального расстояния между фуллереном «1» и соответственно фуллеренами «2»–«14».

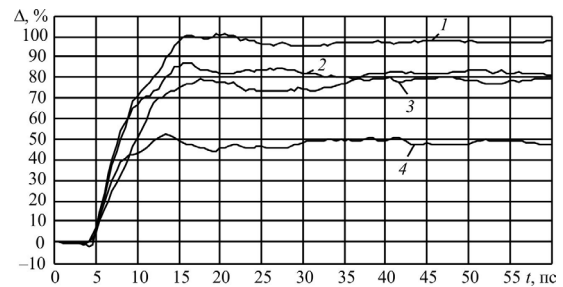


Рис. 5. Поведение фуллеренов, осевших на подложку железа (α = 15°,  $\bar{v} = 0,01$  Å/фс, T = 700 К): 1 – «1»–«2»; 2 – «1»–«3»; 3 – «1»–«4»; 4 – «1»–«5»

Fig. 5. The behavior of fullerenes deposited on the iron substrate (α = 15 degrees,  $\bar{v} = 0.01$  Å/fs, T = 700 K): 1 – «1»–«2»; 2 – «1»–«3»; 3 – «1»–«4»; 4 – «1»–«5»

Из рис. 5 следует, что после удара фуллерита о подложку и осаждения фуллеренов, образующих первый слой фуллерита, на подложке железа наблюдается увеличение расстояния между центральным фуллереном «1» и фуллеренами «2»–«5», достигающего к 15 пс значений, превышающих первоначальные более чем на 40 %, затем фуллерены «2»–«5» начинают занимать квазистационарное положение относительно фуллерена «1». Это существенно отличается от случаев, описанных в статье [18], когда фуллерит контактирует гранью с подложкой, при которых в осевшем на подложке первом слое расстояния между фуллереном «1» и фуллеренами «2»–«5» увеличиваются не более чем на 15 %. Это может объясняться тем, что в приведенной задаче фуллерены имеют составляющую скорости, параллельную контактной поверхности подложки железа.

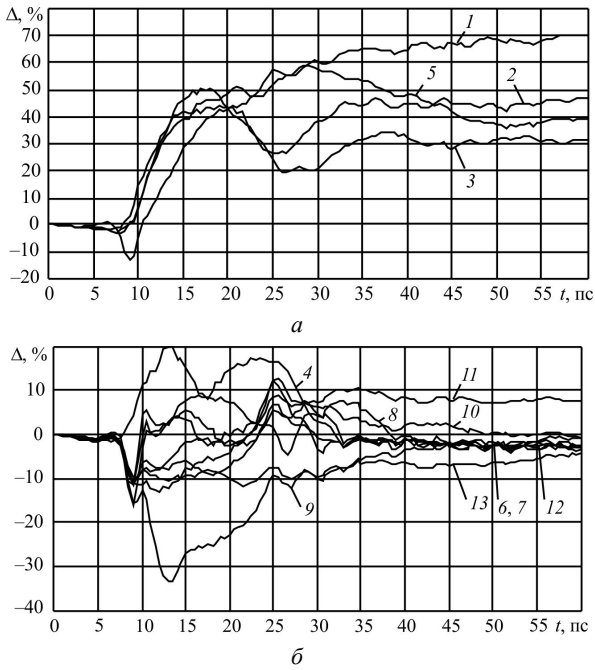


Рис. 6. Поведение фуллеренов, осевших на подложку железа ( $\alpha = 45^\circ$ ;  $\bar{v} = 0,005 \text{ \AA/фс}$ ,  $T = 1150 \text{ K}$ ): а - 1 - «1»-«2»; 2 - «1»-«3»; 3 - «1»-«4»; 5 - «1»-«6»; б - 4 - «1»-«5»; 6 - «1»-«7»; 7 - «1»-«8»; 8 - «1»-«9»; 9 - «1»-«10»; 10 - «1»-«11»; 11 - «1»-«12»; 12 - «1»-«13»; 13 - «1»-«14»

Fig. 6. The behavior of fullerenes deposited on the iron substrate ( $\alpha = 45 \text{ degrees}$ ,  $\bar{v} = 0.005 \text{ \AA/fs}$ ,  $T = 1150 \text{ K}$ ): а - 1 - «1» - «2»; 2 - «1»-«3»; 3 - «1»-«4»; 5 - «1»-«6»; б - 4 - «1»-«5»; 6 - «1»-«7»; 7 - «1»-«8»; 8 - «1»-«9»; 9 - «1»-«10»; 10 - «1»-«11»; 11 - «1»-«12»; 12 - «1»-«13»; 13 - «1»-«14»

В случае, представленном на рис. 6, следует выделить две основные тенденции поведения фуллеренов после контакта фуллерита с подложкой и его осаждения на ней:

- резкое увеличение расстояния между фуллереном «1» и, соответственно, фуллеренами «2»-«4» (первый слой) и фуллереном «6» (второй слой), расстояние между центральным и указанными фуллеренами растет до 50 пс, затем наступает этап квазистационарного равновесия;

- поведение фуллерена «5» (первый слой) и фуллеренов «7»-«14» (второй и третий слои) носит разнонаправленный характер, но после 40 пс они занимают квазистационарное положение, при этом только у фуллерена «12» наблюдается увеличение расстояния между ним и фуллереном «1» на величину порядка 10 %, у остальных фуллеренов к 60 пс расстояние до фуллерена «1» уменьшается.

Таким образом, в случае, представленном на рис. 6, три из четырех фуллеренов первого слоя ведут себя аналогично случаю, приведенному на рис. 5, а большинство фуллеренов второго слоя и все фуллерены третьего слоя практически сохраняют свое первоначальное положение относительно фуллерена «1», что и позволяет сделать вывод о том, что фуллерен осел полностью, но его структура после удара нарушена.

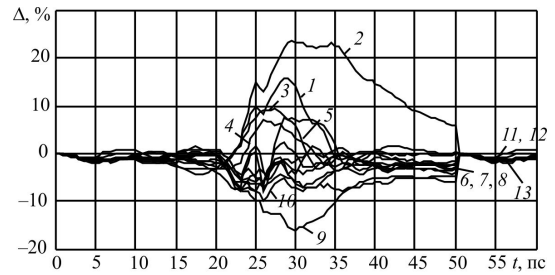


Рис. 7. Поведение фуллеренов, осевших на подложку железа ( $\alpha = 75^\circ$ ;  $\bar{v} = 0,005 \text{ \AA/фс}$ ,  $T = 300 \text{ K}$ ): 1 - «1»-«2»; 2 - «1»-«3»; 3 - «1»-«4»; 4 - «1»-«5»; 5 - «1»-«6»; 6 - «1»-«7»; 7 - «1»-«8»; 8 - «1»-«9»; 9 - «1»-«10»; 10 - «1»-«11»; 11 - «1»-«12»; 12 - «1»-«13»; 13 - «1»-«14»

Fig. 7. The behavior of fullerenes deposited on the iron substrate ( $\alpha = 75 \text{ degrees}$ ,  $\bar{v} = 0.005 \text{ \AA/fs}$ ,  $T = 300 \text{ K}$ ): 1 - «1»-«2»; 2 - «1»-«3»; 3 - «1»-«4»; 4 - «1»-«5»; 5 - «1»-«6»; 6 - «1»-«7»; 7 - «1»-«8»; 8 - «1»-«9»; 9 - «1»-«10»; 10 - «1»-«11»; 11 - «1»-«12»; 12 - «1»-«13»; 13 - «1»-«14»

В случае осаждения фуллерита на подложку, показанного на рис. 7, фуллерены «2»-«6» начинают увеличивать свое расстояние до фуллерена «1», а у остальных фуллеренов, напротив, наблюдается сокращение расстояния до центрального фуллерена, но с 35 пс расстояние от каждого из фуллеренов до фуллерена «1» начинает постепенно возвращаться к первоначальному, а с 50 пс происходит скачкообразное возвращение фуллеренов к исходному положению относительно фуллерена «1». Дальнейшее изменение расстояний носит очень малый характер и связано, скорее всего, с температурными флуктуациями.

Проводя анализ результатов компьютерного моделирования, приведенных в данной статье, следует обратить внимание и на результаты натурального эксперимента, приведенного в работе [36]. Так, в [36] исследовалось осаждение фуллеренов  $C_{60}$  импульсным сверхзвуковым молекулярным пучком (СМП) на подложки различных металлов и оксидов. Для формирования СМП использовались инертные газы аргон (Ar) и гелий (He), которые обогащались фуллеренами  $C_{60}$ , а затем СМП проходил через скиммер, «выделяющий осевую часть потока, за которой располагалась подложка» [36]. В работе [36] не указано, под каким углом к СМП устанавливалась подложка. Однако даже если СМП подавался по нормали к контактной поверхности подложки, ввиду неизбежной турбулизации СМП у какой-то части фуллеренов при контакте с подложкой вектор скорости был направлен под углом ( $\alpha$ ) к нормали, отличным от нуля. Таким образом, можно утверждать, что часть фуллеренов, образующих пленку  $C_{60}$  [36], особенно фуллерены, находящиеся в периферийной зоне пленки, осаждались по механизму, схожему с тем, что описан в данной работе.

## Выводы

Из полученных результатов моделирования осаждения фуллерена на подложку железа при различных углах «встречи» можно сделать следующие выводы:

1. Угол «встречи» фуллерита  $C_{60}$  с подложкой железа оказывает существенное влияние на процесс его осаждения; так, при угле «встречи» фуллерита  $C_{60}$  с подложкой железа в  $15^\circ$  осаждается только первый слой фуллерита  $C_{60}$ , что схоже с результатами взаимодействия, приведенными в [18], где вектор скорости фуллерита направлялся по нормали к подложке, а при углах «встречи»  $45^\circ$  и  $75^\circ$  и скорости  $0,005 \text{ \AA/фс}$  наблюдается полное осаждение фуллерита на подложку, при этом в отдельных случаях структура фуллерита может сохраняться.

2. В отличие от случаев, описанных в статье [18], в данной работе показано, что при осаждении на подложку железа фуллеренов первого слоя в основном наблюдается существенное увеличение расстояния

(до 100 %) между периферийными фуллеренами («2»–«5») и центральным фуллереном «1».

3. Во всех описанных случаях не позднее 50 пс все фуллерены  $C_{60}$ , осевшие на подложку железа, занимают квазистационарное положение.

4. Обобщая результаты, приведенные в данной статье и в работах [18] и [36], можно заключить, что для повышения интенсивности осаждения как фуллеритов в целом, так и отдельных фуллеренов  $C_{60}$  необходимо, чтобы энергия отдельного фуллерена не превышала 1 эВ, при этом величина  $\bar{v}_n$  должна быть как можно меньше, а величина  $\bar{v}_t$  не должна быть слишком большой, чтобы не возникало рикошетирования фуллерита  $C_{60}$ .

## 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 // Вестник Пермского государственного технического университета. 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 // Вестник Пермского государственного технического университета. 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 нанокомпозитах 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 националь-

ного 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. Mohammad 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. Елецкий А.В., Смирнов Б.М. Фуллерены и структуры углерода // Успехи физических наук. – 1995. – Т. 165, № 9. – С. 977–1009.

15. 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

16. 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.

17. 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.

18. Суворов С.В., Северюхин А.В., Вахрушев А.В. Моделирование взаимодействия фуллерита  $C_{60}$  с подложкой твердого тела // Вестник Пермского национального исследовательского политехнического университета. Механика. – 2019. – № 3. – С. 94–103. DOI: 10.15593/perm.mech/2019.3.10

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. Nose S. A molecular dynamics methods for simulation in the canonical ensemble // *Mol. Phys.* – 1984. – Vol. 52. – P. 255–278.

27. Plimpton S. Fast Parallel Algorithms for Short-Range Molecular Dynamics // *J. Comp. Phys.* – 1995. – Vol. 117. – P. 1–19.

28. 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

29. 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

30. 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

31. 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

32. 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

33. 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

34. Kong L.T. Phonon dispersion measured directly from molecular dynamics simulations // *Comp. Phys. Comm.* – 2011. – Vol. 182. – P. 2201–2207.

35. 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.

36. 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.

## 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 kontaktnykh 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 nanoinclusions]. *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., Kulkov 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 simulation of 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.

13. M. Mohan Gokhale, R. Ravindra Somani Fullerenes: chemistry and its applications. *Mini Rev Org Chem*, 2015, v.12, pp. 355-366.

14. Eletskaia A.V., Smirnov B.M. Fullereny i struktury ugleroda [Fullerenes and carbon structures]. *Uspekhi fizicheskikh nauk*, 1995, vol. 165, no. 9, pp. 977-1009.

15. Postawa Z., Rzeznik L., Paruch R., Russo M.F., Winograd 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

16. 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.

17. 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]. *Khimicheskaya fizika i mezoskopiya*, 2013, vol. 15, no. 4, pp. 515-522.

18. Suvorov S.V., Severiuchin A.V., Vakhrushev A.V. Simulation of the interaction fullerite C<sub>60</sub> with the substrate solids. *PNRPU Mechanics Bulletin*, 2019, no. 3, pp. 94-103. DOI: 10.15593/perm.mech/2019.3.10

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. Molekuliarnaya 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. Nose S. A molecular dynamics methods for simulation in the canonical ensemble. *Mol. Phys.*, 1984, vol. 52, pp. 255-278.

27. Plimpton S. Fast Parallel Algorithms for Short-Range Molecular Dynamics. *J. Comp. Phys.*, 1995, vol. 117, pp. 1-19.

28. 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

29. Jaramillo-Botero A., Su J., Qi A., Goddard III W.A. LargeScale, 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

30. 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

31. Sirk T., Sliozberg 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

32. 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

33. 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

34. Kong L.T. Phonon dispersion measured directly from molecular dynamics simulations. *Comp Phys Comm.*, 2011, vol. 182, pp. 2201-2207.

35. 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.

36. 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.