

АННОТАЦИЯ

К ОТЧЕТУ НИР «ПОЛНОАТОМНЫЕ РАСЧЕТЫ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ СПИРАЛЕОБРАЗНЫХ ПИРИДИН-ФУРАНОВЫХ ОЛИГОМЕРОВ НАНОМЕТРОВОГО РАЗМЕРА, СВЯЗАННЫХ МОНОСЛОЕМ ГРАФЕНА»,
выполненных по договору № 202-24 от 15.05.2024 г.
между ООО «ЦЕНТР ПРОЕКТИРОВАНИЯ МОЛЕКУЛЯРНЫХ МАШИН» и ФИЦ ХФ
РАН.

Научный руководитель работ, д.ф.-м.н. Аветисов В. А..

Целью работ являлось получение методами молекулярной динамики информации о вибрационной динамике гибридной молекулярной структуры, состоящей из 7-ми пиридин-фурановых нанопружин, связанных этиленгликольными мостиками с фрагментом графенового листа. Атомистическая модель молекулярной структуры с приложенными к структуре растягивающими силами показана на рис. 1. Растворителем в моделируемой системе являлся тетрагидрофуран.

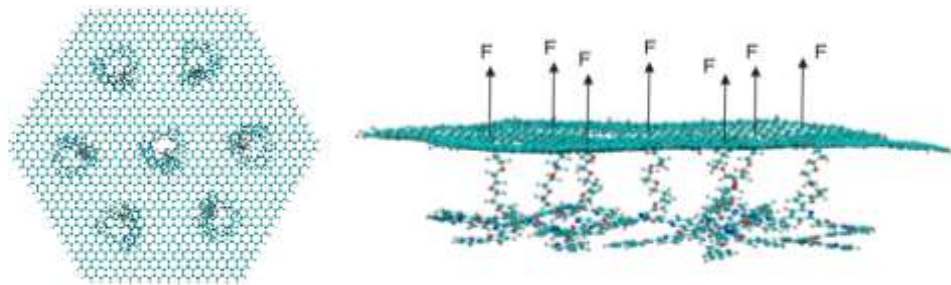


Рисунок 1. Атомистическая модель молекулярной структуры: слева – вид сверху, справа – вид сбоку.

Пиридин-фурановый сополимер является хорошо известным проводящим сополимером, олигомерные фрагменты которого, даже достаточно короткие, в частности, длиной в 7-8 пиридин-фурановых мономеров, могут принимать спиралеобразную форму, которая стабилизируется межвитковым стэкинговым взаимодействием ароматических групп. Недавно было обнаружено, что при некотором (критическом) растяжении пиридин-фурановые нанопружины оказываются бистабильными, с характерными для бистабильной динамики эффектами спонтанных вибраций и стохастического резонанса. Классическом аналогом здесь может служить бистабильный осциллятор Дуффинга. Заметим, что в отличие от обычного осциллятора, вибрации бистабильной системы не имеют собственной частоты. С другой стороны, известно, что если бистабильным системам навязать определенные динамические связи, то может возникнуть эффект их динамической синхронизации даже в том случае, когда все они продолжают находиться в режиме спонтанных вибраций. Молекулярно-динамические исследования, проводимые по данному Договору, по сути, и были нацелены на то, чтобы прояснить, может ли в конструкции, показанной на рисунке 1, возникнуть спонтанная синхронизация бистабильных нанопружин.

Работы проводились в один этап в соответствии с Техническим Задаанием Договора и Календарным планом. Основной результат данных исследований заключается в том, что синхронизация спонтанных вибраций пиридин-фурановых нанопружин в указанной конструкции наблюдаться может, и среднее по всем нанопружинами значение коэффициента синхронизации по может достигать 0.8.