

ИССЛЕДОВАНИЕ ТЕРМИЧЕСКОЙ УСТОЙЧИВОСТИ УГЛЕВОДОРОДНЫХ НАНОСТРУКТУР, ПОСТРОЕННЫХ ИЗ КУБИЛЕНОВЫХ ЕДИНИЦ

М.М. Маслов

*Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ»
Каширское шоссе д.31, г Москва 115409, Россия
e-mail: Mike.Maslov@gmail.com*

Целью настоящей работы является теоретическое исследование олигомеров, построенных из кубиленовых единиц (дегидрированных кубанов), в том числе моделирование процессов их распада и расчет энергий активации и частотных факторов в формуле Аррениуса для температурной зависимости времени жизни. Расчеты проводились в рамках разработанной нами неортогональной модели сильной связи [1]. Методом структурной релаксации найдены конфигурации линейных олигомеров вида $C_8H_7-(C_8H_6)_N-C_8H_7$ с $N=0-10$, см. рис. 1, “длиной” от двух до двенадцати кубиленовых фрагментов, а также двумерных олигомеров размерностью от 2×2 (рис. 2) до 5×5 и определены их геометрические и энергетические характеристики.

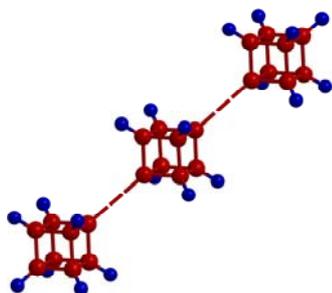


Рис. 1. Общий вид линейных олигомеров, построенных из кубиленовых фрагментов

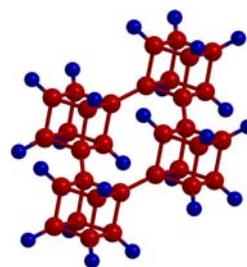


Рис. 2. Двумерный олигомер 2×2 , состоящий из четырех кубиленовых фрагментов

Для определения энергий активации процессов распада E_a мы проанализировали температурные зависимости времени жизни τ малых олигомеров: кубилкубана (ССВ), трикубила (3СВ), тетракубила (4СВ) и циклического тетракубила (cycle-4СВ), используя формулу Аррениуса: $\tau(T) = A^{-1} \exp(E_a/k_B T)$, где A – частотный фактор. Мы получили: $E_a = 1.6 \pm 0.1$ эВ и $A = 10^{16.51 \pm 0.44} \text{ c}^{-1}$ для ССВ, $E_a = 1.1 \pm 0.1$ эВ и $A = 10^{14.88 \pm 0.32} \text{ c}^{-1}$ для 3СВ, $E_a = 1.1 \pm 0.1$ эВ и $A = 10^{14.94 \pm 0.37} \text{ c}^{-1}$ для 4СВ, $E_a = 1.1 \pm 0.1$ эВ и $A = 10^{15.26 \pm 0.37} \text{ c}^{-1}$ для cycle-4СВ [2]. Отметим, что для кубана в рамках той же модели $E_a = 1.9 \pm 0.1$ эВ и $A = 10^{16.03 \pm 0.36} \text{ c}^{-1}$ [3].

Литература

1. Maslov M.M., Podlivaev A.I., Openov L.A. Nonorthogonal tight-binding model for hydrocarbons // Phys. Lett. A. 2009. V. 373. P. 1653–1657.
2. Маслов М.М. Термическая устойчивость линейных олигомеров, построенных из кубиленовых единиц // Хим. Физ. 2010. в печати.
3. Маслов М.М., Лобанов Д.А., Подливаев А.И., Опенов Л.А. Термическая устойчивость кубана C_8H_8 // ФТТ. 2009. Т. 51. С. 609–612.