

Эволюция наноразмерной высокотетраэдрической компоненты межзвездной среды

А. В. Сиклицкая

АФТУ РАН, Санкт-Петербург, Россия

Известно, что наноалмазы диаметром 2 нм, присутствуют в межзвездной среде, поскольку были обнаружены в досолнечных метеоритах [1]. Известно также, что углеродные луковичные структуры, образующиеся в результате отжига высокотетраэдрических углеродных нанокластеров, поглощают электромагнитное излучение вблизи известного в астрофизике пика 217.5 нм на кривой экстинкции света [2,3]. Этим же свойством обладают наночастицы алмаза, покрытые оболочкой sp^2 -координированных атомов [2]. В качестве одного из возможных механизмов образования луковичных структур из наноалмазов является механизм разогрева кластера, происходящего в результате многофотонного поглощения ультрафиолетовой части спектра звезд [4]. Однако, диапазон температур, при котором происходит превращение нанокластеров алмаза диаметром 2 нм, и другие его параметры, исследованы недостаточно. Поэтому интересно исследовать модификацию высокотетраэдрических кластеров углерода таких размеров отжигом. В настоящей работе методами молекулярной динамики проведено исследование стабильности и эволюции наноразмерных кластеров тетраэдрического углерода начиная с момента их зарождения при изменении их температуры. Показано, что кластер высокотетраэдрического углерода размером 2 нм стабилен в отсутствии водорода. Поверхность такого кластера представляет собой сетку sp^2 -координированных атомов (оболочку), обволакивающую высокотетраэдрическое ядро. Исследована радиальная функция распределения расстояний в таком кластере. Ее анализ показывает, что в диапазоне температур 4.2 $\times 10^4$ - T_c К (T_c -температура фазового перехода), толщина оболочки зависит от температуры и времени эволюции нелинейно, достигая максимального значения при временах эволюции порядка тысяч фемтосекунд. При температуре выше T_c весь кластер претерпевает превращение в сетку sp^2 -координированных атомов. При дальнейшем росте температуры ($T > T_c$) происходит аморфизация кластера.

Литература

1. Li, A. 2004, ASP Conf. Ser. 309, Astrophysics of Dust, ed. A. N. Witt, G. C. Clayton, & B. T. Draine (San Francisco, CA: ASP), 417
2. Yastrebov S. , Smith R. Astrophysical Journal, 697 (2009) 1822
3. Chhowalla, M. , Wang, H. , Sano, N. , Teo, K. B. K. , Lee, S. B. , & Amaratunga, G. A. J. 2003, Phys. Rev. Lett. , 90, 155504
4. Li, A. , Chen, J. H. , Li, M. P. , Shi, Q. J. , & Wang, Y. J. 2008, MNRAS, 390, L39