

На правах рукописи

Катин Константин Петрович

ДИНАМИЧЕСКИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ ПРОЦЕССОВ ОТЖИГА И  
РАСПАДА МАЛЫХ УГЛЕРОДНЫХ КЛАСТЕРОВ

01.04.07 – Физика конденсированного состояния

АВТОРЕФЕРАТ

диссертации на соискание ученой степени  
кандидата физико-математических наук

Автор:

Москва – 2011

Работа выполнена в Национальном исследовательском ядерном университете «МИФИ»

НАУЧНЫЙ РУКОВОДИТЕЛЬ: Кандидат физико-математических наук, доцент **Подливаев Алексей Игоревич**

ОФИЦИАЛЬНЫЕ ОППОНЕНТЫ: Доктор физико-математических наук **Сулимов Владимир Борисович**  
Доктор физико-математических наук **Дядькин Александр Петрович**

ВЕДУЩАЯ ОРГАНИЗАЦИЯ: Институт прикладной математики им. М.В. Келдыша РАН, г. Москва

Защита состоится «\_\_» \_\_\_\_\_ 2011 г. в \_\_ час. \_\_ мин. на заседании диссертационного совета Д 212.130.06 при Национальном исследовательском ядерном университете «МИФИ» по адресу: 115409, г. Москва, Каширское шоссе, д.31.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке НИЯУ МИФИ

Автореферат разослан «\_\_\_\_\_» 2011 года

Просим принять участие в работе совета или прислать отзыв в одном экземпляре, заверенном печатью организации, по адресу НИЯУ МИФИ на имя ученого секретаря диссертационного совета.

Ученый секретарь диссертационного совета  
доктор физико-математических наук, профессор

В.П. Яковлев

## ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

**Актуальность диссертационной работы:** Фуллерены - это сферообразные кластеры углерода, которые с момента открытия в 1985 году фуллерена  $C_{60}$  (см. рис. 1) и до настоящего времени находятся в центре внимания многих научных групп, ведущих их экспериментальные и теоретические исследования. К настоящему времени уже известно несколько десятков различных фуллеренов, в том числе  $C_{70}$ ,  $C_{36}$  и т.д. В 2000 году был обнаружен наименьший из возможных фуллеренов – кластер  $C_{20}$ , в котором связи С-С образуют только пятиугольники, а шестиугольники (в отличие от фуллеренов большего размера) отсутствуют.

В исследованиях фуллеренов важное место занимает изучение дефектов этих структур. Последовательность термоактивированных переходов между дефектными изомерами представляет интерес как с точки зрения устойчивости фуллерена к тепловому распаду, так и с точки зрения обратного процесса – многоступенчатого отжига дефектов, в результате которого и происходит, возможно, формирование собственно фуллерена из исходного сильно разупорядоченного кластера.

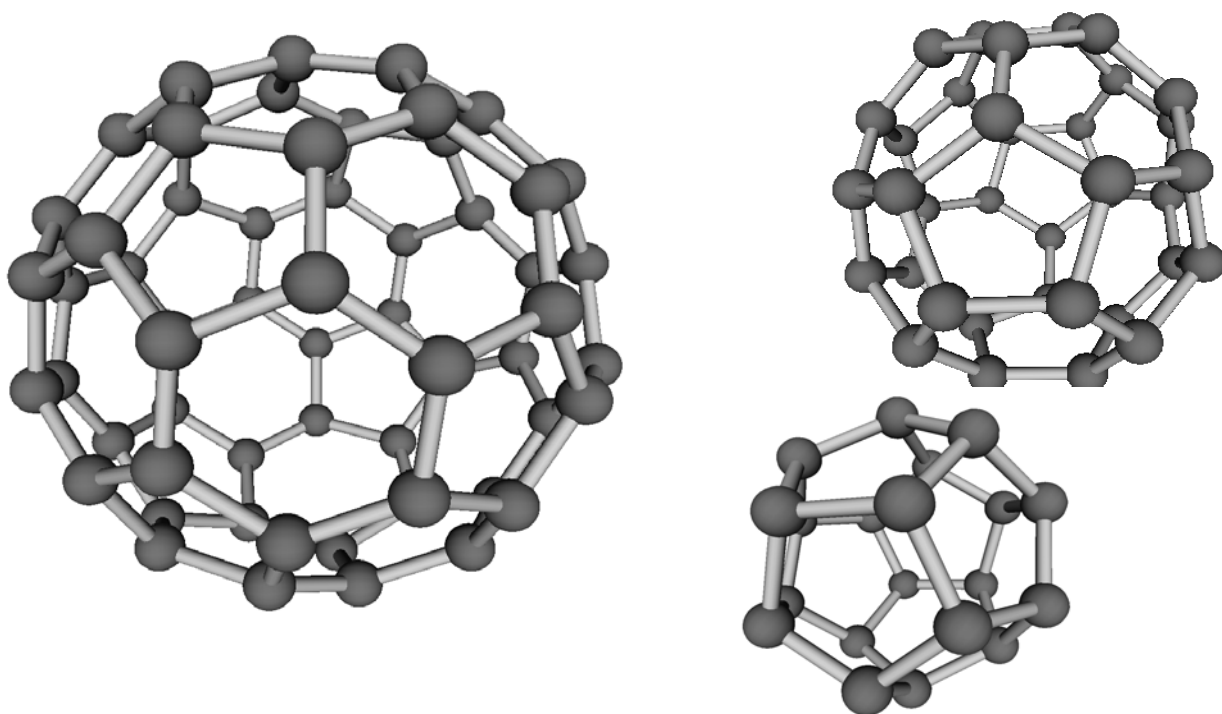


Рис.1. Фуллерены  $C_{60}$ ,  $C_{36}$  и  $C_{20}$ .

При экспериментальном изучении скорости дефектообразования, изомеризации или распада атомного кластера необходимо учитывать, что эти реакции могут протекать по нескольким каналам с разными энергиями активации, каждый из которых дает свой вклад в измеряемую константу скорости. При проведении специальных экспериментов в буферном газе интерпретация опытных данных осложняется также тем, что частотный фактор реакции может зависеть как от состава, так и от давления инертной атмосферы. Эти обстоятельства затрудняют непосредственное измерение энергий активации разных каналов реакции и делают актуальным компьютерное моделирование рассматриваемых процессов.

В настоящей диссертации теоретически исследованы каналы и продукты отжига, изомеризации и распада углеродных фуллеренов  $C_{20}$ ,  $C_{36}$  и  $C_{60}$ , а также ряда углеводородных молекул. Получены температурные зависимости скоростей этих процессов при различных внешних давлениях. Проведен сравнительный анализ различных подходов к моделированию малых углеродных кластеров. Рассмотрены методы молекулярной динамики, алгоритм Метрополиса и метод статического исследования потенциальной энергии системы. Разработана оригинальная многомасштабная методика, основанная на комбинированном алгоритме молекулярной динамики и Монте-Карло, позволившая рассчитать термическую устойчивость фуллеренов с недостижимой ранее точностью. Предложена аналитическая зависимость скорости процесса образования дефекта в кластере от температуры и внешнего давления, обобщающая закон Аррениуса на случай кластеров и молекул, находящихся в слабом тепловом контакте с окружающей средой.

**Цель работы:** Целью диссертационной работы явилось определение динамических характеристик процессов изомеризации и распада фуллеренов  $C_{20}$ ,  $C_{36}$ ,  $C_{60}$ , а также малых углеводородных кластеров при различных внешних давлениях и температурах.

Для достижения поставленной цели были решены следующие

**задачи:**

- усовершенствован алгоритм Метрополиса для численного расчета вероятности возникновения сильных флуктуаций потенциальной энергии малого атомного кластера;
- разработан многомасштабный комбинированный алгоритм молекулярной динамики и Монте-Карло для исследования изомеризации и распада атомного кластера, определения каналов, продуктов и скорости распада;
- предложено обобщение Аррениусовской температурной зависимости времени жизни атомного кластера с учетом интенсивности его теплообмена с окружающей средой;
- исследованы основные каналы возникновения дефектов в фуллеренах  $C_{20}$  и  $C_{36}$ ;
- вычислены параметры, определяющие зависимость времени изомеризации или распада фуллеренов  $C_{20}$ ,  $C_{36}$ ,  $C_{60}$ , а также молекул метана, этила и пропила от температуры и давления, в частности, частотные факторы и энергии активации этих процессов.

**Научная новизна работы:** В ходе проведенных исследований впервые были получены следующие результаты:

- Проведено моделирование изомеризации и распада фуллеренов в течение макроскопического физического времени, достигающего 100 с;
- определены энергии активации и частотные факторы этих процессов с недостижимой ранее точностью;
- выявлено существование двух независимых фаз в трансформации Стоуна-Уэльса в фуллеренах  $C_{20}$ ,  $C_{36}$ ,  $C_{60}$ ; показано, что преобладание трансформации с одной или двумя фазами зависит от размера фуллерена;
- получено обобщение аррениусовской температурной зависимости времени распада или изомеризации на случай системы, находящейся в слабом тепловом контакте с окружающей средой.

**Практическая значимость работы:** Разработанная в настоящей диссертации методика исследования малых атомных кластеров может быть использована при численном исследовании малых атомных кластеров и молекул, подборе оптимального давления и температуры для их синтеза или разложения. В частности, предложенный алгоритм пригоден для оптимизации скорости пиролиза углеводородного сырья и других нефтехимических реакций.

Кроме того, предложенную методику можно применить для определения каналов и продуктов химических реакций при низких температурах и детального изучения других микропроцессов, протекающих за макроскопические времена  $\sim 1$  с.

**Основные положения, выносимые на защиту:**

1. Усовершенствованный алгоритм Метрополиса для определения вероятности редких сильных флуктуаций потенциальной энергии малого атомного кластера.
2. Комбинированный алгоритм молекулярной динамики и Монте-Карло для исследования эволюции малых атомных кластеров в течение макроскопического времени  $\sim 1$ с, определения скорости, продуктов и каналов их распада.
3. Рассчитанные значения параметров, определяющих зависимость времени жизни до распада или перехода в другой изомер фуллеренов  $C_{20}$ ,  $C_{36}$ ,  $C_{60}$  и молекул метана, этила и пропила от температуры и давления, в том числе частотные факторы этих процессов.
4. Обобщение формулы Аррениуса для температурной зависимости времени жизни кластера с учетом интенсивности его теплообмена с окружающей средой.



**Достоверность научных результатов, расчетов и выводов:**

Достоверность теоретических исследований, проведенных в диссертации, подтверждается известными экспериментальными данными, а также результатами численных расчетов, проводимых ранее независимыми авторами в рамках других методик.

**Личный вклад соискателя:** Все результаты, представленные в работе, получены соискателем лично, либо в соавторстве при его непосредственном участии.

**Объем и структура работы:** Диссертация состоит из Введения и обзора литературы, пяти глав и Заключения. Общий объем – 148 страниц, включая 33 рисунка, 4 таблицы и список цитируемой литературы из 123 наименований.

**Апробация работы:** Изложенные в настоящей диссертации результаты докладывались на Международной конференции по теоретической физике Дубна-Нано2010 (Dubna-Nano2010, 7–11 июля 2010 г., Дубна, Россия), 9-ой Международной конференции «Фуллерены и атомные кластеры» (IWFAC'2009, 6–10 июля 2009 г., Санкт-Петербург, Россия), 2-ой Всероссийской конференции «Многомасштабное моделирование процессов и структур в нанотехнологиях» (ММПСН-2009, 27–29 мая 2009 г., Москва), Конференции «Физикохимия нано- и супрамолекулярных систем –

2009» (3–4 декабря 2009 г., ИФХЭ РАН, Москва), 3-ем Международном конкурсе научных работ молодых ученых в области нанотехнологий в рамках Международного форума по нанотехнологиям (Rusnanotech'10, 6–8 октября 2010 г., Москва, Россия), Научных Сессиях МИФИ 2007, 2008, 2009, 2010, 2011 гг., в том числе на XIII Конференции «Молодежь и наука» в рамках Научной Сессии МИФИ-2010 и XIV Конференции «Молодежь и наука» в рамках Научной Сессии МИФИ-2011.

Результаты, полученные в ходе работы над диссертацией, обсуждались на семинаре им. К.И. Бабенко (ИПМ РАН, г. Москва, председатель – д.ф.-м.н., проф. К.В. Брушлинский), семинаре Центра Фотохимии РАН (ЦФ РАН, г. Москва, председатель – д.х.н., проф. А.А. Багатурьянц), и семинаре «Молекулярное моделирование биологически активных соединений» (НИВЦ МГУ им. М.В. Ломоносова, г. Москва, председатель – д.ф.-м.н., проф. В.Б. Сулимов).

**Публикации:** По теме диссертации опубликованы 22 печатные работы в научных журналах и сборниках трудов Международных и Российских конференций, в том числе 7 статей в журналах, рекомендованных ВАК.

## ОСНОВНОЕ СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

**Во Введении** дана краткая характеристика работы и обзор литературы по методам атомистического и многомасштабного моделирования атомных кластеров, кратко рассмотрены межатомные потенциалы взаимодействия, описана модель сильной связи, выделены основные статические, детерминистические и стохастические методы исследования, перечислены главные особенности многомасштабного подхода.

**В первой главе** в рамках статического подхода (поиск устойчивых и неустойчивых стационарных точек потенциальной энергии кластера как функции координат всех составляющих его атомов) определены высоты минимальных энергетических барьеров, препятствующих изомеризации или распаду фуллеренов  $C_{20}$ ,  $C_{36}$ ,  $C_{60}$ . В 1986 г. Стоуном и Уэльсом было показано, что наиболее вероятным каналом дефектообразования в фуллерене  $C_{60}$  является характерная трансформация углеродного скелета, инициирующая его дальнейшее разрушение и состоящая в повороте одной из С-С связей на угол  $90^{\circ}$ . Согласно нашим расчетам, для малых фуллеренов  $C_{20}$ ,  $C_{28}$ ,  $C_{36}$  характерна «неполная» трансформация Стоуна-Уэльса, при которой С-С связь поворачивается на угол около  $45^{\circ}$ , переводя фуллерен в его

метастабильный изомер с двумя смежными «окнами» на поверхности. В дальнейшем возможно завершение трансформации Стоуна-Уэльса (преобладает в фуллерене  $C_{36}$ ) или образование других «окон» на поверхности кластера (преобладает в фуллеренах  $C_{20}$  и  $C_{28}$ ). Таким образом, было показано, что образование дефекта в любом фуллерене начинается с «неполной» трансформации Стоуна-Уэльса, а дальнейший сценарий изомеризации или распада определяется размером фуллерена.

**Во второй главе** рассмотрен метод молекулярной динамики, сущность которого состоит в решении системы уравнений Ньютона для каждого из атомов кластера. Исследованы шесть наиболее распространенных разностных схем для интегрирования этих уравнений. Показано, что схема velocity Verlet лучше других сохраняет полную энергию и другие интегралы движения кластера, и поэтому позволяет более корректно моделировать его изомеризацию и распад. Проведен сравнительный анализ способов учета теплообмена между кластером и окружающей средой в рамках молекулярно-динамических подходов. Показано немонотонное влияние интенсивности теплообмена на скорость распада молекулы метана. Рассчитаны энергия активации и частотный фактор для трансформации Стоуна-Уэльса в фуллерене  $C_{36}$ .

**Третья глава** посвящена стохастическому исследованию малых атомных кластеров при помощи алгоритма Метрополиса. При исследовании дефектообразования большой интерес представляют области конфигурационного пространства кластера, соответствующие высокой потенциальной энергии  $U$ , поскольку в момент образования дефекта кластер оказывается на «вершине» энергетический барьера, разделяющего два дефектных изомера. Стохастическое исследование этих областей часто требует слишком много компьютерных ресурсов, поскольку в соответствии с распределением Гиббса кластер очень редко оказывается в конфигурации с высокой  $U$ . Для решения этой проблемы Стейнер в 1998 г предложил рассматривать кластер в деформированном потенциале межатомного взаимодействия, заменяя  $U$  на  $\max(U, U_0)$ , где  $U_0$  – некоторая константа, называемая уровнем деформации потенциала. В тех областях, где  $U > U_0$ , исходный и деформированный потенциалы совпадают, и все статистические характеристики кластера с точностью до нормировки остаются неизменными.

Мы усовершенствовали этот подход, последовательно используя множество возрастающих уровней деформации, причем нормировка для каждого последующего уровня деформации определялась на предыдущем уровне. Это позволило радикально

увеличить быстродействие алгоритма и доказать, что плотность вероятности обнаружить фуллерен  $C_{20}$  в состоянии с потенциальной энергией  $U$  с точностью  $\sim 1\%$  совпадает с расчетом в рамках гармонического приближения вплоть до значений  $U$ , соответствующих его распаду. Это означает, что подавляющее большинство колебательных мод фуллерена  $C_{20}$  в ходе распада остаются гармоническими.

**В четвертой главе** приведено описание нового многомасштабного комбинированного алгоритма молекулярной динамики и Монте-Карло для исследования эволюции кластера в течение макроскопического времени. Область конфигурационного пространства кластера, расположенная вблизи дна потенциальной ямы ( $U < U_0$ ), считается стационарной и равновесной и описывается при помощи алгоритма Метрополиса, а область вблизи точки распада ( $U > U_0$ ) рассматривается в рамках молекулярно-динамического подхода. Величина  $U_0$ , разделяющая эти области, подвергается многоступенчатому увеличению, аналогично тому, как это делалось для уровня деформации потенциала в главе 3. Многоступенчатая структура предлагаемого алгоритма обеспечивает быстродействие, недоступное ранее известным методам.

При помощи этого алгоритма исследованы скорости распада

ряда фуллеренов и углеводородных молекул, а энергии активации и частотные факторы соответствующих процессов определены с недостижимой ранее точностью благодаря широкому диапазону доступных расчету времен «жизни» кластеров  $\tau=10\text{пс}\div 100\text{с}$ .

**В пятой главе** предложено обобщение формулы Аррениуса для температурной зависимости времени жизни кластера с учетом интенсивности его теплообмена с термостатом. Количественной характеристикой интенсивности теплообмена служит характерное время термализации  $\tau_{\text{th}}$ , за которое начальная внутренняя энергия  $E$  кластера достигает своего равновесного значения. Для кластера, находящегося в вакууме,  $\tau_{\text{th}}\rightarrow\infty$ , в буферном газе –  $\tau_{\text{th}}\sim 10$  нс, в жидкости или на твердой подложке –  $\tau_{\text{th}}\sim 100$  фс.

Чтобы определить зависимость время жизни кластера  $\tau(T, \tau_{\text{th}})$  от температуры  $T$  и времени термализации  $\tau_{\text{th}}$ , мы использовали балансное кинетическое уравнение

$$\frac{\partial n(E, t)}{\partial t} = \frac{1}{\tau_{\text{th}}} \left( -n(E, t) + S(E, T) \cdot \int_0^{\infty} n(E', t) dE' \right) + I \cdot \delta(E - E_0) - \frac{1}{\tau_0(E)} n(E, t),$$

описывающее изменение концентрации  $n(E, t)$  кластеров с внутренней энергией  $E$  в момент времени  $t$ . Подразумевается, что в систему с интенсивностью  $I$  добавляются кластеры, обладающие энергией  $E_0$ ; через  $\tau_0(E)$  обозначено среднее время жизни теплоизолированного

кластера с энергией  $E$ . Равновесная плотность распределения кластеров по энергиям  $S(E, T)$  берется в гармоническом приближении, что обосновано результатами, полученными в главе 3.

Время жизни кластера  $\tau$  находится из стационарного решения  $n_0(E)$  рассматриваемого уравнения, исходя из соотношения

$$\int_0^{+\infty} n_0(E) dE = \tau \cdot I :$$

$$1/\tau = (1/\tau_{th} + 1/\tau_0(CT)) \cdot \int_0^{\infty} S(E, T) (1/\tau_0(E)) / (1/\tau_{th} + 1/\tau_0(E)) dE \quad (1)$$

Величина  $\tau_0(E)$  определяется по формуле, предложенной Райсом в 1928 г.:

$$\tau_0(E) = \begin{cases} \xi \cdot \left(1 - \frac{E_a}{E}\right)^{1-X}, & E \geq E_a \\ +\infty, & E \leq E_a \end{cases}$$

где  $E_a$  – энергия активации,  $X$  – число степеней свободы,  $\xi \approx \xi_0 + \xi_1 \cdot (1/\tau_{th} T)$ , три параметра  $(E_a, \xi_0, \xi_1)$  характеризуют кластер и должны быть определены из эксперимента или при помощи численного расчета. Отметим, что в предельных случаях  $\tau_{th} \rightarrow \infty$  и  $\tau_{th} = 0$  предлагаемая нами формула (1) переходит в хорошо известные зависимости Райса и Аррениуса соответственно.

Набор параметров  $(E_a, \xi_0, \xi_1)$ , определяющих скорость термического распада или изомеризации посредством формулы (1),



определен нами для ряда фуллеренов и углеводородных молекул. Показано хорошее согласие формулы (1) с экспериментальными данными и независимыми численными расчетами сторонних авторов (напр., на рис.2 представлен результат для распада молекулы этила).

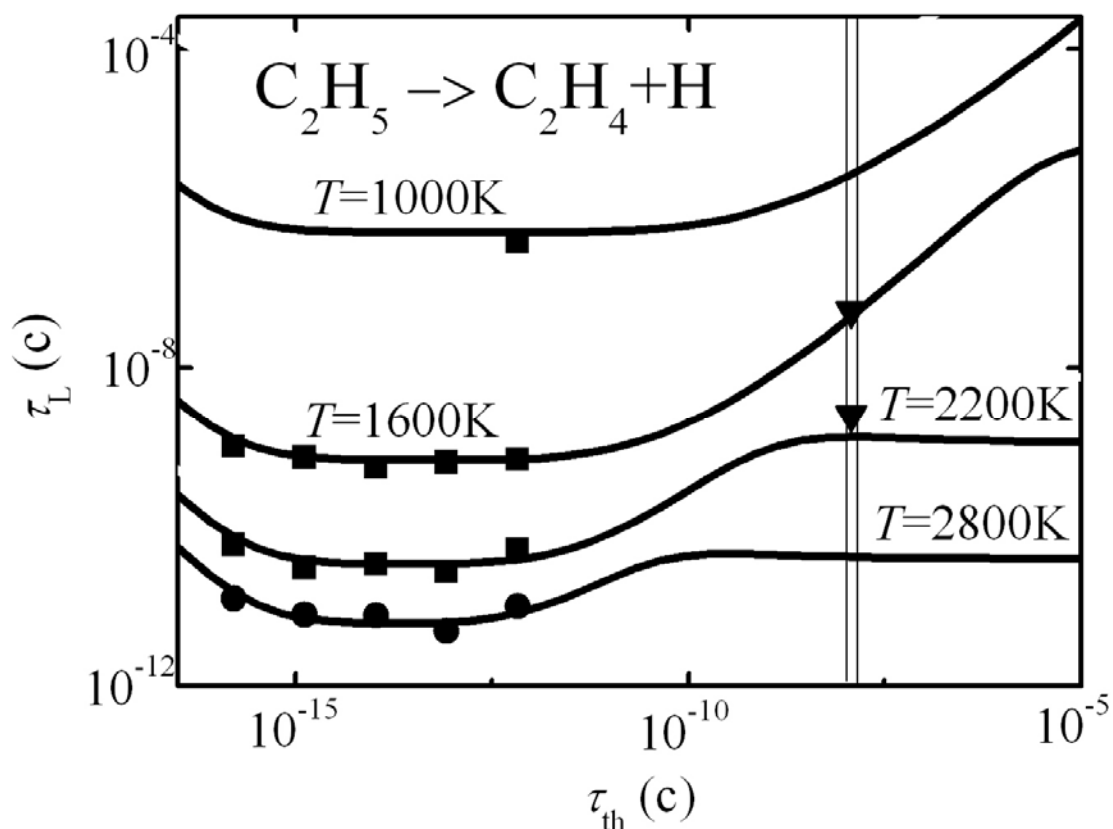


Рис. 2. Зависимость времени распада молекулы этила  $\tau_L$  от характерного времени теплообмена  $\tau_{th}$  с окружающей средой. Линии – расчет по формуле (1) с подобранными параметрами  $E_a=1.52$  эВ,  $\xi_0=10.87$  пс,  $\xi_1=1.017 \cdot 10^{-3}$  фс<sup>2</sup>\*К, квадратики – расчет комбинированным методом молекулярной динамики и Монте-Карло (см. главу 4), кружки – расчет методом молекулярной динамики (см. главу 2), треугольники – результаты эксперимента, выполненного в атмосфере аргона при  $T=1600-2200$  К и  $P=2.5-3.5$  Торр. Тонкие вертикальные линии отмечают область изменения параметра  $\tau_{th}$  при проведении эксперимента.

**В Заключении** кратко перечислены основные результаты, полученные в настоящей диссертации, и приведен список опубликованных по теме диссертации работ.

## ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ

1. Изучены начальные стадии распада фуллеренов  $C_{20}$  и  $C_{36}$ , определены минимальные высоты энергетических барьеров, препятствующих изомеризации и распаду этих фуллеренов; обнаружено сходство между трансформацией Стоуна-Уэльса в фуллеренах  $C_{36}$ ,  $C_{60}$  и распадом фуллерена  $C_{20}$ ; показано, что трансформация Стоуна-Уэльса в фуллеренах состоит из двух последовательных фаз, причем преобладание трансформации с одной или с двумя фазами зависит от размера фуллерена;
2. Предложено усовершенствование алгоритма Метрополиса, позволившее радикально увеличить его быстродействие и показать квазигармоническое поведение фуллерена  $C_{20}$  вплоть до момента распада;
3. Предложен новый комбинированный алгоритм молекулярной динамики с методом Монте-Карло, позволивший рассчитать время изомеризации или распада фуллеренов  $C_{20}$ ,  $C_{36}$ ,  $C_{60}$  а также молекул

метана, этила и пропила в широкой температурной области, недоступной ранее известным методам, и определить энергии активации и частотные факторы этих процессов с высокой точностью;

4. Предложена основанная на кинетическом уравнении статистическая модель, из которой аналитически получена температурная зависимость времени отжига, изомеризации или распада атомного кластера, обобщающая формулу Аррениуса. В рамках полученной формулы рассчитана скорость термической изомеризации и распада ряда фуллеренов и малых углеводородных молекул.

#### ПУБЛИКАЦИИ ПО ТЕМЕ ДИССЕРТАЦИИ

1. Подливаев А.И., Катин К.П., Лобанов Д.А., Опенов Л.А. Неполная трансформация Стоуна-Уэльса – основной канал возникновения дефектов в фуллеренах  $C_{20}$  и  $C_{36}$  // ФТТ. 2011. Т. 53. С. 199-204.
2. Подливаев А.И., Катин К.П. О зависимости времени жизни атомного кластера от интенсивности его теплообмена с окружающей средой // Письма в ЖЭТФ. 2010. Т. 92. С. 54-58.

3. Катин К.П., Подливаев А.И. Динамические характеристики низкотемпературного распада фуллерена  $C_{20}$  // ФТТ. 2010. Т. 52. С. 407-409.
4. Katin K.P., Lobanov D.A., and Maslov M.M. Numeric simulation of Platonic hydrocarbons and fullerenes // J. Phys.: Conf. Ser. 2010. V. 248. P. 012011-012014.
5. Катин К.П., Подливаев А.И. Динамика теплового распада фуллерена  $C_{20}$  при различных давлениях // Изв. ВУЗов. Физика. 2010. Т. 3/2. С. 151-153.
6. Подливаев А.И., Катин К.П. Моделирование ангармонических процессов и распада малых атомных кластеров при низких температурах // Науч.-техн. вед. СПГПУ (физ.-мат. сер.). 2009. Т. 83. С. 24-30.
7. Катин К.П., Подливаев А.И., Опенов Л.А. Особенности методов динамического моделирования отжига и распада долгоживущих атомных кластеров // Инженерная физика. 2007. № 3. С. 55–58.
8. Katin K.P., Podlivaev A.I. Dependence between the frequency factor of fullerene  $C_{20}$  thermal decay and buffer gas pressure // Book of Abstracts of 9<sup>th</sup> Biennial International Workshop Fullerenes and Atomic Clusters. St. Petersburg, 2009. P. 254.

9. Katin K.P., Lobanov D.A., and Maslov M.M. Thermal stability of the platonic hydrocarbons and fullerenes // Dubna-Nano2010: Book of Abstracts of the International Conference on Theoretical Physics. Dubna: JINR, 2010. P. 106.
10. Maslov M.M., Katin K.P. Numerical simulation of the C<sub>4</sub>H<sub>4</sub> tetrahedrane molecule thermal decomposition // Nanotechnology International Forum: The Third International Competition of Scientific Papers for Young Researches. Moscow, 2011. El. issue, ISBN 978-5-9902492-1-9.
11. Katin K.P., Maslov M.M. Multiscale modeling of the petrochemical reactions and optimization of their conditions // Nanotechnology International Forum: The Third International Competition of Scientific Papers for Young Researches. Moscow, 2011. El. Issue, ISBN 978-5-9902492-1-9.
12. Катин К.П., Подливаев А.И. Новый алгоритм расчета динамики разложения углеводородных наноструктур. Кинетика реакции получения этилена при пиролизе этила // XIII конференция «Молодежь и наука»: Сб. докладов. Часть 1 / М.: МИФИ, 2010. С. 159–161.
13. Лобанов Д.А., Катин К.П., Подливаев А.И. и Опенов Л.А. Различные фазы трансформации Стоуна-Уэльса в фуллеренах C<sub>20</sub>, C<sub>36</sub>

и  $C_{60}$  // Науч. сессия НИЯУ МИФИ-2010: Аннотации докладов: В 3 т. М.: НИЯУ МИФИ, 2010. Т. 2. С. 53.

14. Катин К.П., Подливаев А.И. Особенности эффективного взаимодействия атомов водорода на поверхности наноуглеродной структуры // Науч. сессия НИЯУ МИФИ-2010: Аннотации докладов: В 3 т. М.: НИЯУ МИФИ, 2010. Т. 2. С. 52.

15. Катин К.П., Подливаев А.И. Определение частотного фактора теплового распада фуллерена  $C_{20}$  при различных давлениях буферного газа // II Всероссийская конференция «Многомасштабное моделирование процессов и структур в нанотехнологиях»: Сб. тезисов докладов. М.: МИФИ, 2009. С. 194–195.

16. Катин К.П., Подливаев А.И. Зависимость частотного фактора распада фуллерена  $C_{20}$  от давления буферного газа // Науч. сессия МИФИ-2009: Сб. науч. тр. В 17 т. М.: МИФИ, 2009. Т. 2. С. 38.

17. Катин К.П., Подливаев А.И. О непарном взаимодействии атомов водорода на поверхности фуллерена // Конференция «Физикохимия нано- и супрамолекулярных систем – 2009»: Сб. тезисов докладов. М.: ИФХЭ РАН, 2009. С. 31.

18. Подливаев А.И., Катин К.П. Определение частотного фактора распада фуллерена  $C_{20}$  // Науч. сессия МИФИ-2008: Сб. науч. тр. В 17 т. М.: МИФИ, 2008. Т. 7. С. 80-82.

19. Катин К. П., Подливаев А.И. Особенности методов молекулярной динамики при моделировании термического отжига и распада долгоживущих атомных кластеров // Науч. сессия МИФИ-2007: Сб. науч. тр. В 17 т. М.: МИФИ, 2007. Т. 4. С. 163-165.
20. Подливаев А.И., Катин К. П. Баллистический и диффузионный режимы моделирования тепловых колебаний в фуллерене  $C_{20}$  // Науч. сессия МИФИ-2007: Сб. науч. тр. В 17 т. М.: МИФИ, 2007. Т. 4. С. 165–167.
21. Катин К. П., Подливаев А.И. Обобщение закона Аррениуса для температурной зависимости скорости химических реакций // Науч. сессия НИЯУ МИФИ-2011: Аннотации докладов: В 3 т. М.: НИЯУ МИФИ, 2010. Т. 2. С. 50.
22. Катин К.П., Подливаев А.И. Термоактивируемый вентиль для высвобождения молекулярного водорода из углеродной наноструктуры // XIV конференция «Молодежь и наука»: Сб. докладов. Часть 1 / М.: МИФИ, 2011. С. 159–160.