

Проект КП-06-КОСТ/10 от 07.08.2023

Аб иницио симулации на взаимодействието на единични въглеродни атоми и малки въглеродородни молекули в космоса

2023- 2025 год. 50 000 лв.

финансиран от ФНИ в рамките на COST акция CA21126 - Carbon molecular nanostructures in space (NanoSpace) <https://www.cost.eu/actions/CA21126/>

Ръководител на научния колектив: доц. д-р Теодор Миленов

Резюме

Има различни въглеродни нано- частици (nC) открити в космоса и в космически обекти. Колективът по проекта планира да използва квантово- химични изчислителни методи основани на молекулна динамика. Основен инструмент ще бъде теорията на плътностния функционал (DFT) в приближение на генерализирания градиент (GGA), както и под хибридни функционали, имплементирани в пакета CP2K/Quickstep. Нашите изследвания в рамките на предложени проект ще бъдат съсредоточени върху началните етапи на синтеза на нано- въглеродни частици, започвайки от взаимодействието на единични въглеродни атоми. На първият етап на проекта ще бъдат симулирани взаимодействията на единични атоми, както и на системи, съдържащи, както единични въглеродни атоми, така и до 3-4 въглеродни атоми в sp^2 или sp^3 хибридизация. Целта на тези задачи е симулацията в динамика на началните фази на синтеза на 2D/3D въглеродни нано- частици, което ще даде подробности за механизмите на образуване на въглеродните и въглеродородни атомни ансамбли, които биха могли да бъдат предшественици на присъстващите nC в космоса: като хидрогениран аморфен въглерод и междוזвезден прах. Полученият резултат от тези изследвания ще даде указание какви устойчиви алотропни форми на въглерода ще бъдат синтезирани в началните етапи на взаимодействие. На следващият етап ще бъде симулирано нарастването на 2D/3D nC от sp^2 или sp^3 хибридизиран въглерод, като за моделни частици ще бъдат използвани листове от дефектен графен и 2D/ 3D частици със смесена sp^2 или sp^3 хибридизация с единични атоми и/или клъстери от C- атоми и/или малки въглеродородни молекули. Като малка въглеродородна молекула ще бъдат използвани етанови или ацетиленови радикали (етен или ацетилен с редуцирано съдържание на водород). Полученият резултат от тези задачи ще даде информация за реакционните пътища между 2D/3D въглеродни наночастици от дефектен графен/ диаманто- подобен въглерод и малките въглеродни/ въглеродородни молекули- основен въпрос за COST акцията CA 21126.