

01; 02

© 1993

МОДЕЛИРОВАНИЕ УСТОЙЧИВОЙ МОЛЕКУЛЫ ФУЛЛЕРЕНА

В.В. К и р с а н о в, И.Ю. Я н о в

Кластер C_{60} , называемый также фуллереном, который был обнаружен в парах графита в 1985 г. Крото и Смолли, сразу привлек к себе внимание из-за высокосимметричной формы и большой устойчивости. Еще более интерес к этой новой модификации углерода усилился после открытия в легированном щелочными металлами твердом C_{60} сверхпроводимости.

Эксперименты показывают, что кластер C_{60} является почти правильным усеченным икосаэдром, содержащим 12 пятиугольных и 20 шестиугольных граней (см. рис. 1, а). В каждой вершине сходятся два шестиугольника и один пятиугольник. Длина связи в ребре, соединяющем две шестиугольные грани, порядка 1.38 \AA , а ребро, соединяющее пятиугольник и шестиугольник — 1.43 \AA . Атомы углерода расположены в среднем на расстоянии 3.5 \AA от центра [1]. При кристаллизации молекулы C_{60} образуют ГЦК структуру, причем кластерная структура в кристалле сохраняется.

Интересные физико-химические свойства фуллерена вызвали попытки провести моделирование его структуры и свойств. Поскольку в фуллерене присутствуют ковалентные связи, причем двух типов, наиболее адекватными были бы расчеты структуры молекулы из первых принципов. Однако это очень громоздкая задача даже для расчета статической конфигурации изолированного кластера и практически невыполнимая для изучения его динамики. Поэтому актуальной является задача нахождения подходящего многоатомного классического потенциала межатомного взаимодействия.

Был проведен анализ нескольких таких потенциалов [2-4], каждый из которых позволяет описать ряд модификаций углерода. Наиболее оптимальным, с нашей точки зрения, представляется потенциал, предложенный в [4]:

$$U_{ij} = \frac{A \cdot \exp(-b1 \cdot R_{ij}^2)}{R_{ij}^2} - \frac{G_{ij} \cdot \exp(-b2 \cdot R_{ij}^2)}{R_{ij}^2},$$

где фактор G_{ij} зависит от локального окружения атомов i и j .

Этот потенциал дает правильные длины связей и энергию когезии для углерода в структурах алмаза и графита.

Расчеты равновесной структуры кластера проводились методом молекулярной динамики с искусственной диссипацией энергии [5].

В результате была получена динамически стабильная равновесная конфигурация кластера C_{60} , имеющая следующие характе-

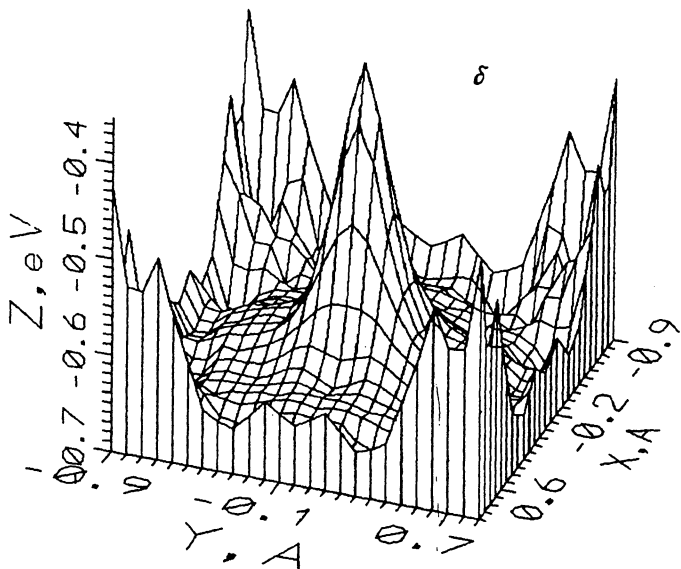
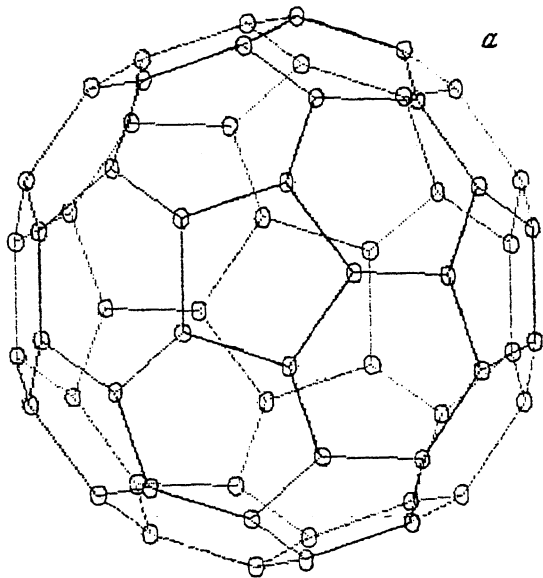


Рис. 1. а – равновесная конфигурация атомов в молекуле фуллерена; б – рельеф потенциального поля в центре фуллерена, построенный на экваториальном сечении.

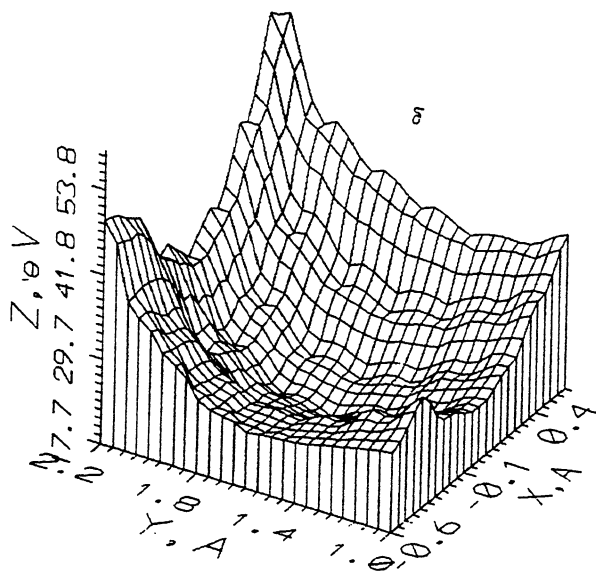
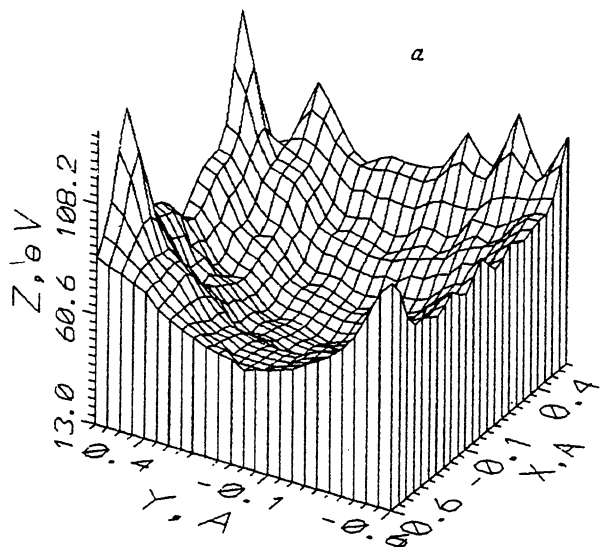


Рис. 2. а - рельеф потенциального поля, построенный на пятиугольной грани C_{60} , б - рельеф потенциального поля, построенный на шестиугольной грани C_{60} .

ристики: длины связей 1.4 и 1.47 Å, энергия связи на один атом 6.8 эВ. Эти значения в пределах 5% совпадают с результатами квантовомеханических расчетов [6] и экспериментом [1].

Дополнительно был построен рельеф потенциальной поверхности в центре кластера на экваториальном сечении (рис. 1, б) и на гранях кластера (рис. 2, а, б). Как видно из рисунков, центр кластера является неустойчивым положением для внедренного атома углерода. Это соответствует масс-спектрометрическим данным, которые подтверждают, что кластеры углерода с нечетными номерами значительно менее стабильны. Потенциальный рельеф на гранях кластера дает значения потенциальных барьеров 17.5 и 10.3 эВ для внедрения атомов через пятиугольную и шестиугольную грани соответственно.

Целью нашей дальнейшей работы является изучение процесса образования кластера. Мы попробуем использовать модель сворачивающегося листа графита, что, по-видимому, физически наиболее близко к реальному процессу образования кластера C_{60} из графита в электрической дуге.

Данная работа была выполнена при поддержке Государственной Программы Российской Федерации „Высокотемпературная сверхпроводимость“, Проект № 92048 „Микроструктура“.

С п и с о к л и т е р а т у р ы

- [1] Y a n n o n i C.S. et al. // J. Am. Chem. Soc. 1991. V. 113. P. 3190.
- [2] T e r s o f f J. // Phys. Rev. B. 1988. V. 38. P. 9902.
- [3] K h o r K.E., S a r m a S.D. // Phys. Rev. B. 1988. V. 38. P. 3318
- [4] C h e l i k o w s k y J.R. // Phys. Rev. Lett. 1991. V. 67. P. 2970.
- [5] К и р с а н о в В.В., М у с и н Н.Н. Алгоритм расчета динамики радиационного повреждения и свойств точечных дефектов в высокотемпературных сверхпроводниках: Препринт ТвПИ, Тверь, 1990. 60 с.
- [6] A d a m s G.B. et al. // Phys. Rev. B. 1991. V. 44. P. 4052.

Тверской
политехнический институт

Поступило в Редакцию
12 мая 1993 г.