

2. Мошников В. А., Шилова О. А. Золь-гель-технология наноструктурированных материалов. / В кн.: Нанотехнология: Физика, процессы, диагностика, приборы.- М. Физматлит, 2006.- С. 205–249.
3. Грачева И.Е., Максимов А.И., Мошников В.А, Плех М.Е. Автоматизированная установка для измерения газочувствительности сенсоров на основе полупроводниковых наноконструкций // Приборы и техника эксперимента. – 2008. – № 3. – С. 143-146.

## КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ИК-СПЕКТРОВ ФУЛЛЕРЕНА ВО ВНЕШНЕМ ПОСТОЯННОМ ЭЛЕКТРИЧЕСКОМ ПОЛЕ

А.В. Тучин, студент  
ГОУ ВПО «Воронежский  
государственный университет»

Экспериментальное открытие и синтез в макроскопических количествах фуллеренов вызвали широкие и многосторонние исследования этих молекул. Фуллерен и его многочисленные производные, благодаря своим уникальным свойствам, представляют собой перспективные объекты для использования в химии, биологии и медицине, физике и электронике [1]. Большое количество экспериментальных методов было использовано для получения информации об их электрических и оптических свойствах. Экспериментальные результаты по поглощению в УФ, ИК и видимом диапазоне, ЯМР, потенциал ионизации, сродство к электрону хорошо согласуются с теоретическими предсказаниями и численными расчетами. Исследование фуллеренов экспериментально предполагает наличие сложного, дорогостоящего оборудования. Поэтому широко применяется компьютерное моделирование в специальных программных комплексах, одним из которых является программный комплекс для расчета квантово - механических задач Gaussian03.

Gaussian03 позволяет рассчитывать различные свойства молекулярных систем и конденсированных сред, находящихся не только в основном, но и в возбужденных состояниях. Активно ведутся эксперименты над фуллеренами и фуллеритами, как материалами электроники и фотоники, поэтому необходимо глубже изучать процессы, происходящие в молекуле фуллерена во внешнем поле. Однако не все результаты моделирования могут оказаться адекватными, поэтому необходима экспериментальная проверка полученных данных. Связующим звеном является ИК-спектр, который может быть рассчитан на компьютере и экспериментально проверен.

Целью данной работы является исследования влияния электрического поля на вибрационный спектр фуллерена.

Оптимизация геометрии и расчет вибрационных спектров проводились методом DFT, используя приближение локальной спиновой плотности LSDA в базисе 3-21G. ИК-спектр основного состояния фуллерена, рассчитанный данным методом хорошо согласуется с экспериментальным [2]. В присутствии электрического поля атомы смещаются, а величина смещения зависит от начального квантового состояния частицы и величины поля, при этом, в адиабатическом приближении, частицы остаются на одном и том же квантовом подуровне, энергия которого зависит от напряженности поля. Критерием выбора величины поля послужила работа [3], оценка дает для фуллеритов значение напряженности электрического поля  $\sim 10^7$  В/см. При моделировании молекула C<sub>60</sub> была помещена во внешнее постоянное электрическое поле, величиной  $E=5,14 \cdot 10^7$  В/см, которое вызвало перераспределение заряда в системе и появление дипольного момента, относительное удли-

нение фуллерена составляет 0,15%. Поле также привело к химическому сдвигу, что отразилось на снятии вырождения ЯМР спектра фуллерена и значительному его усложнению. Расчет ЯМР и ИК- спектров проводился после оптимизации геометрии. Положение основных пиков (496, 576, 1153 и 1475  $\text{cm}^{-1}$ ) для свободного фуллерена изменилось на 491, 588, 1192 и 1490  $\text{cm}^{-1}$  соответственно, также отмечена активация еще шести колебательных мод 265, 788, 1117, 1252, 1536 и 1604  $\text{cm}^{-1}$ , (см. рис.).

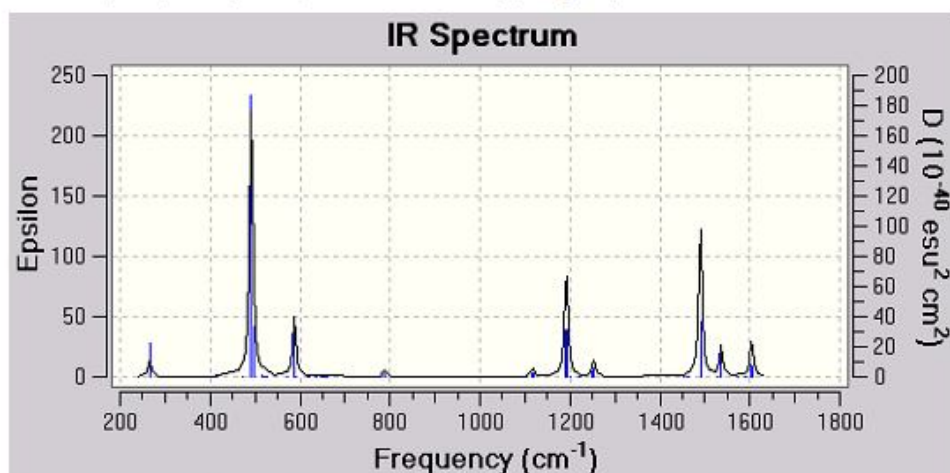


Рис. ИК-спектр фуллерена во внешнем электрическом поле

Усложнение ИК-спектра молекулы произошло из-за понижения симметрии фуллерена и возбуждения  $\pi$ -электронной системы. На фуллерен C<sub>60</sub> распространяется напряжённая  $\pi$ -электронная модель. При этом каждый атом углерода имеет три гибридные орбитали и три электрона на образование трёх двухэлектронных  $\sigma$ -связей с соседними атомами. Четвёртый электрон расположен на гибридной  $p$ -орбитали ортогональной к трём  $\sigma$ -орбиталям, ориентированным вдоль связей с соседними атомами. Электронная структура фуллеренов, как и всех углеродных соединений, определяется  $\pi$ -электронной системой [3]. Внешнее электрическое поле изменяет состояния молекулярных орбиталей (МО). Методом МО показано, что воздействие электрического поля изменяет, в основном,  $\pi$ -электронную систему, что согласуется с работой [4]. Таким образом, внешним электрическим полем можно направленно менять реакционные свойства фуллерена, влиять на реакции полимеризации.

#### Литература

1. Han Young Yu Electrical evidence for the encapsulation of C<sub>60</sub> inside a carbon nanotube: Random telegraph signal and hysteric current-voltage characteristics // *Phys. Rev. B.* – 2008. – № 78. – 155415.
2. Елецкий А.В. Фуллерены // *УФН.* – 1993. – Т.163, №2. – С.33-60.
3. Макарова Т.Л. Электрические и оптические свойства мономерных и полимеризованных фуллеренов // *ФТП.* – 2001. – Т 35, №3. – С. 257- 293.
4. Shen H. Geometrical deformation and failure behavior of C<sub>60</sub> fullerene dimer under applied external electric field // *Molecular Simulation.* – 2006. – V. 32, № 1. – P. 59 – 64.
- 5.