

О ВОЗМОЖНОМ ПУТИ ОБРАЗОВАНИЯ ФУЛЛЕРЕНОВ И УГЛЕРОДНЫХ НАНОТРУБОК

Поклонский Н. А., Бубель О. Н., Кисляков Е. Ф., Вырко С. А.
Белорусский государственный университет. Минск, Беларусь,
poklonski@bsu.by

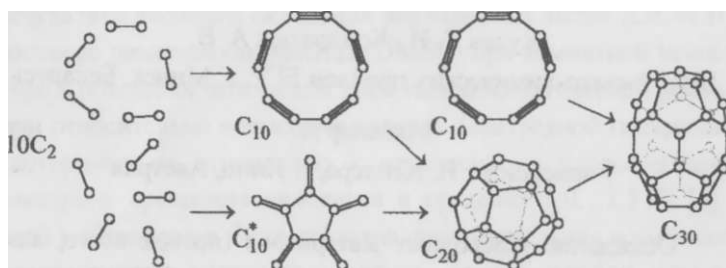
Исследования механизмов образования и роста углеродных наноструктур [1] представляют интерес в связи с поисками путей оптимизации их получения. Наиболее приемлемой моделью образования фуллеренов в настоящее время считается «путь фуллерена» [2], согласно которой, углеродные кластеры становятся фуллеренами при **30...40** атомах в кластере, и дальнейший рост кластера является уже ростом фуллерена за счет вставки C_2 . Слабым местом этой модели является отсутствие четких представлений о механизме образования малых фуллеренов. После экспериментального доказательства устойчивости фуллерена C_{20} [3], модели образования фуллеренов с участием C_m , как промежуточного звена, становятся более обоснованными. Фуллерен C_{20} может быть также зародышем при образовании углеродных нанотрубок. Нанотрубки **(5,0)**, с таким же как и у C_{20} диаметром, наблюдались в экспериментах [4].

Нами предлагается модель образования фуллерена C_{20} и последующего его роста в высшие фуллерены путем слияния колец C_5 , присутствующих в углеродной плазме в большом количестве. Предлагаемый нами путь образования фуллеренов изображен на рисунке.

Ключевым моментом модели является присутствие в углеродной плазме метастабильного кластера C^*_5 . Нами были выполнены расчеты всех участвующих в процессе молекул полуэмпирическим методом молекулярных орбиталей PM3 [5]. Расчеты изменения свободной энергии Гиббса AG дают отрицательные значения в интервале температур **300...4000** К на всех этапах процесса, за исключением $C_5 + C^*_5 \rightarrow C_{20}$ ($AG < 0$ при $T < 2300$ К). После образования C_{20} рост фуллеренов путем присоединения колец C_5 происходит очень быстро. Этим можно объяснить отсутствие

кластеров между C_{20} и C_{30} («мертвая зона») в плазме дугового разряда [1]. Если в плазме нет выделенного направления, то процесс роста фуллеренов заканчивается на C_{10} и C_{20} . Если же есть выделенное направление (например, за счет специальной формы электродов), то растут нанотрубы.

Таким образом, предлагаемый нами путь образования фуллеренов позволяет понять известные свойства углеродной плазмы дугового разряда. Работа поддержана Фондом фундаментальных исследований РБ (грант Ф01-199).



Литература

1. Curl R. F. On the formation of the fullerenes // *Phil. Trans. R. Soc. Lond. A* -1993 - V.343, N.1667 - P.19-32.
2. Heath J. R. Synthesis of Qofrom small carbon clusters: a model based on experiment and theory // *In Fullerenes: synthesis, properties and chemistry of large carbon clusters* / Eds. G. S. Hammond, V. J. Kuck.- Washington, DC: ACS, 1991,- P.1-23.
3. Gas-phase production and photoelectron spectroscopy of the smallest fullerene, C_{20} / H. Prinzbach, A. Weiler, P. Landenberger et al. // *Nature*.- 2000.- V.407, N.6800.- P.60-63.
4. Superconductivity in 4angstrom single-walled carbon nanotubes/ Z.K.Tang, L.Zhang, N.Wang et al. // *Science*.- 2001,- V.292, N.5526 - P.2462-2465.
5. Stewart J. J. P. Optimization of parameters for semiempirical methods // *J. Comp. Chem*.-1989,- V.10, N.2.- 209-264.