

ЭНЕРГИЯ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ФУЛЛЕРЕНА И ГРАФЕНА

¹Тен Г.Н., ¹Глухова О.Е., ¹Слепченков М.М., ¹Пантюшин В.Ю., ²Баранов В.И.

¹ Саратовский государственный университет им. Н.Г. Чернышевского, г.Саратов

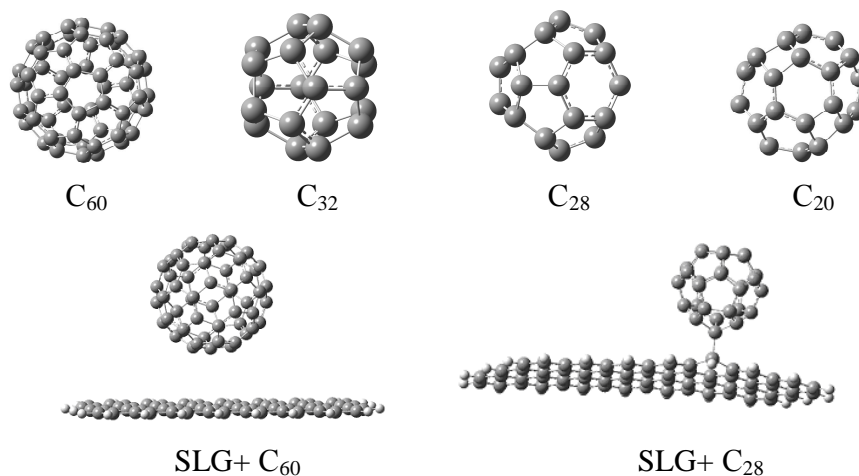
² Институт геохимии и аналитической химии им. В.И. Вернадского РАН, г.Москва

¹Тен Г.Н.,
¹Глухова О.Е.,
¹Слепченков М.М.,
¹Пантюшин В.Ю.,
²Баранов В.И.
¹Саратовский
государственный
университет им.
Н.Г. Чернышевского,
г.Саратов
² Институт геохимии и
аналитической химии им.
В.И. Вернадского РАН,
г.Москва

Фундаментальное исследование механизмов связывания классического фуллерена C_{60} и однослойного графенового листа (SLG) ранее было выполнено авторами работы [1]. Были рассмотрены четыре конфигурации взаимодействия, среди которых наиболее выгодной оказалась конфигурация, при которой атом углерода на поверхности фуллерена расположен точно над атомом углерода графена [1].

В данной работе были рассчитаны энергии взаимодействия комплексов SLG с фуллеренами C_{60} , C_{32} , C_{28} и C_{20} . Расчёт был выполнен методом DFT с помощью программы Gaussian-09 и набора базисных функций 6-31g(d,p) [2].

На рис. приведены молекулярные структуры рассматриваемых фуллеренов и комплексы C_{60} и C_{28} с SLG.



Вычисленные энергии связей для комплексов SLG+C₆₀, SLG+C₃₂ и SLG+C₂₀ составляют 0.045, 0.178 и 0.653 кДж/моль соответственно. Для конфигурации SLG с C₂₈ наблюдается образование ковалентной связи СС, энергия которой составляет 40.613 кДж/моль.

Литература

1. *Laref S., Asaduzzaman A.M., Beck W., Deymier P.A., Runge K., Adamowicz L., Muralidharan K.* Characterization of graphene–fullerene interactions: Insights from density functional theory // *Chem. Phys. Lett.* 2013. V. 582. P. 115–118
2. *Frisch M.J., Trucks G.W., Schlegel H.B. et al.* Gaussian 09. Gaussian Inc., Wallingford CT, 2009. 394 p.