

Равновесные структуры комплексов $\text{Li}[\text{C}_n]_1$ ($n=5-16$) моделирующие внедрение лития в нанотрубки типа zigzag.

Балашов Александр Михайлович, Ермилов Александр Юрьевич

аспирант

МГУ им. М.В. Ломоносова, химический факультет, кафедра физической химии,

лаборатория строения и квантовой механики молекул

E-mail: alex_balashov@mail.ru

Методом функционала плотности рассчитана электронная структура и найдены оптимальные геометрии комплексов лития с цилиндрическими углеводородами $[\text{C}_n]_1$ ($n=5-16$). Углеводород представляет собой систему из n конденсированных бензольных колец замкнутых в цилиндр (точечная группа симметрии D_{nh}) в соответствии с топологией углеродной нанотрубки типа zigzag..

Расчеты проведены с помощью программы PC GAMESS; использован обменно-корреляционный потенциал PBE0 с базисами 6-31G* на углероде и литии, и STO-3G на атомах водорода.

Типы равновесных конфигураций комплексов, включая их симметрию сильно различаются в зависимости от количества бензольных колец. Для комплексов с $n=5,6$ оптимальная геометрия отвечает группе симметрии D_{5h} и C_{6v} соответственно, при этом литий располагается на оси высшего порядка.

В комплексах с $n=7-12$ имеет место чередование симметрии равновесных структур в соответствии с чётностью n . В комплексах с чётным n литий располагается над центром одного из углеродных шестиугольников на расстоянии $\sim 2 \text{ \AA}$, причём структура обладает симметрией C_{2v} . При нечётном n оптимальная геометрия характеризуется выходом металла к краю цилиндра на границу π – электронной плотности; структура отвечает группе симметрии C_s .

При дальнейшем росте n ($n=13-16$) чередование в строении комплексов пропадает; все структуры однотипны и отвечают группе симметрии C_{2v} .

Работа поддержана РФФИ (№ 07-03-01021-а) и программой ведущих научных школ НШ-7022.2006.3.