

Научная статья

УДК 54.022

DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.17203>

СПОСОБЫ ФОРМИРОВАНИЯ СТРУКТУРЫ ФУЛЛЕРЕНОВ НА ПРИМЕРЕ ИЗОМЕРОВ C_{28} И C_{30}

А. Н. Матвиенко ✉

Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого,

Санкт-Петербург, Россия

✉ matvienko_an@spbstu.ru

Аннотация. В работе завершена систематизация возможных путей образования изомеров фуллеренов C_{28} и C_{30} . Получено дополнительное подтверждение, что фуллерены, образованные встраиванием димеров в исходную структуру, имеют минимальную энергию. Рассмотрены и два других способа образования новых фуллеренов, а именно – соединение двух куполов с одинаковой симметрией и соединение фуллеренов с совместимой симметрией. Порядок симметрии исследуемых фуллеренов меняется от второго к седьмому. Совместный анализ значений энергии формирования и результатов геометрического моделирования фуллеренов позволил сделать выводы о структурных изменениях полученных структур.

Ключевые слова: димер, изомер, симметрия, фуллерен, энергия

Для цитирования: Матвиенко А. Н. Способы формирования структуры фуллеренов на примере изомеров C_{28} и C_{30} . // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2024. Т. 17. № 2. С. 33–38. DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.17203>

Статья открытого доступа, распространяемая по лицензии CC BY-NC 4.0 (<https://creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0/>)

Original article

DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.17203>

THE WAYS TO FORM FULLERENS STRUCTURE EXEMPLIFIED BY C_{28} AND C_{30} ISOMERS

A. N. Matvienko ✉

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University, St. Petersburg, Russia

✉ matvienko_an@spbstu.ru

Abstract. The systematization of possible ways to form C_{28} and C_{30} fullerene isomers has been completed in this work. An additional confirmation was obtained that fullerenes created by incorporating dimers into the initial structure had a minimum energy. Two other methods for the formation of new fullerenes were also considered, namely, the connection of two domes with the same symmetry and that of fullerenes with compatible symmetry. The symmetry order of the studied fullerenes varied from the second to the seventh ones. A collaboration analysis of the formation energy values and geometric simulation results allowed us to draw conclusions about the structural changes in the resulting fullerenes.

Keywords: dimer, isomer, symmetry, fullerene, energy

For citation: Matvienko A. N., The ways to form fullerens structure exemplified by C_{28} and C_{30} isomers, St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics. 17 (2) (2024) 33–38. DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.17203>

This is an open access article under the CC BY-NC 4.0 license (<https://creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0/>)

Вступление

В работе [1] была проведена классификация наиболее естественных механизмов образования новых фуллеренов. Как стало известно, это слияние фуллеренов, имеющих совместимую симметрию, встраивание димера углерода в исходный фуллерен и слияние углеродных куполов, имеющих одинаковую симметрию [2 – 5].

Данное исследование завершает рассмотрение структур и энергий фуллеренов C_{28} и C_{30} , которые образуются по указанным механизмам.

Цель работы – рассмотреть серии изомеров фуллеренов от C_{20} до C_{30} и на их примере проверить правильность прежней идентификации того или иного механизма образования новых фуллеренов.

В связи с поставленной целью, в работе изучены структуры фуллеренов с одинарными (простыми) и двойными связями. Условием наличия двойных связей считалось симметричное расположение их максимального количества.

Формирование изомеров фуллеренов C_{28}

Рассмотрим пять основных способов получения новых моделей фуллеренов.

Встраивание димера в многогранник C_{26} .

Совершенные фуллерены.

Способ I. Внедрение димера в шестиугольник спереди, параллельно оси третьего порядка, превращает фуллерен C_{26} в фуллерен C_{28} . Образуется совершенный фуллерен, обладающий симметрией вращения-отражения второго порядка. Такой фуллерен содержит двенадцать пятиугольников и четыре шестиугольника.

Способ II. Внедрение димера происходит под углом 60° к оси симметрии третьего порядка исходного фуллерена. Получается совершенный фуллерен с симметрией вращения-отражения второго порядка. Если в случае I исходный фуллерен следует повернуть на 90° , чтобы получить зеркальное изображение, то в данном случае II достаточно его повернуть только на 30° . Образованный таким способом фуллерен также содержит двенадцать пятиугольников и четыре шестиугольника (рис. 1).

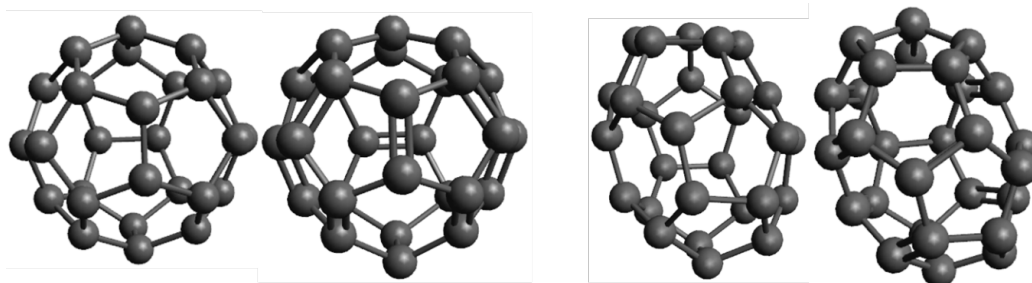


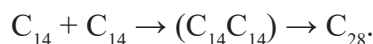
Рис. 1. Встраивание углеродного димера в исходный идеальный фуллерен; показаны способы с параллельным внедрением (способ I) и внедрением под углом 60° (способ II)

Способ III. Встраивание димера в многогранник C_{26} . Топологическая симметрия. Встраивание димера в шестиугольник на заднем плане превращает фуллерен C_{24} в фуллерен C_{26} . Поскольку он содержит два дополнительных междоузлия, получается несовершенный фуллерен, обладающий топологической симметрией третьего порядка [6]. Образованный фуллерен содержит два треугольника, шесть пятиугольников и восемь шестиугольников.

Способ IV. Слияние двух разных куполов, имеющих совместимую симметрию. Одним из возможных способов реализации является реакция слияния купола C_{10} и чаши C_{18} . Такую реакцию можно записать в виде



Способ V. Соединение двух семиугольных призм. Оба исходных фуллерена обладают одинаковой симметрией седьмого порядка. Реакция имеет следующий вид (рис. 2):



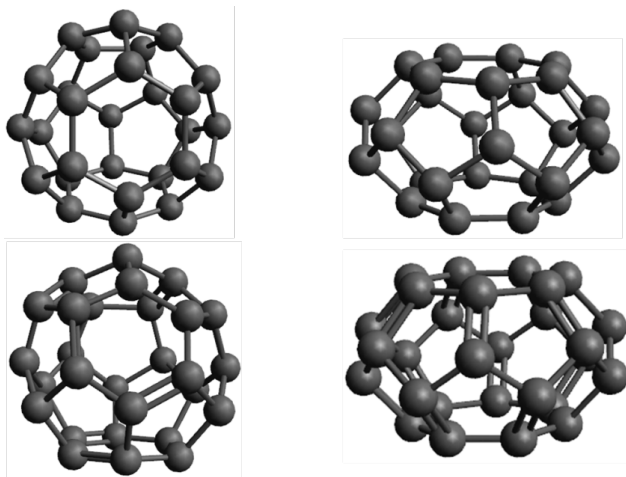


Рис. 2. Слияние двух разных куполов (способ IV) и двух семиугольных призм (способ V)

Формирование изомеров фуллеренов C_{30}

Два угловых способа встраивания димера. Совершенные фуллерены

Способ VI. В совершенный фуллерен C_{28} [7] (см. способ I) встраивается димер углерода в один из двух шестиугольников на экваторе исходного фуллерена. Получается превращение фуллерена C_{28} в фуллерен C_{30} . Образованный многогранник содержит двенадцать пятиугольников и пять шестиугольников.

Способ VII. Начальная конфигурация представлена на рис. 1 (см. способ II). В предыдущем случае (см. способ VI) исходную половину фуллерена необходимо повернуть на 90° градусов, чтобы получить зеркальное изображение. В

данном случае необходимо совершить поворот только на 30° . Имеется еще одно отличие: встраивание производится под углом 60° . Такие операции превращают исходный фуллерен в фуллерен C_{30} . Полученный фуллерен содержит также двенадцать пятиугольников и пять шестиугольников (рис. 3) [8].

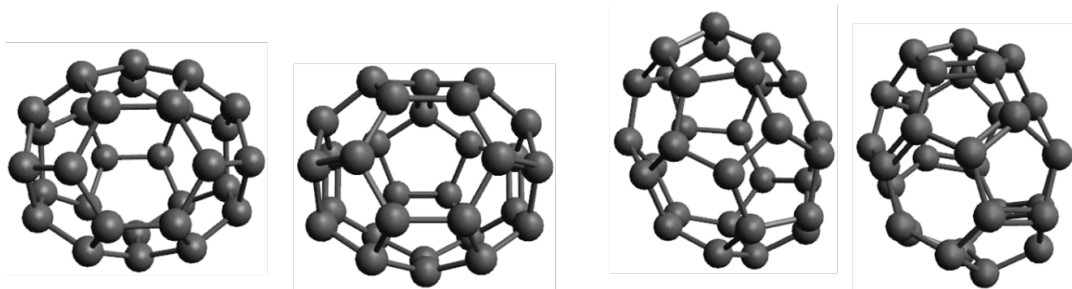


Рис. 3. Два угловых способа встраивания димера: на экваторе (способ VI) и под углом 60° (способ VII)

Способ VIII. Слияние купола C_{10} с куполом C_{20} . Совершенный фуллерен. Обе исходные конфигурации имеют симметрию пятого порядка. После слияния образуется фуллерен, состоящий из пяти квадратов, двух пятиугольников и десяти шестиугольников. Получается совершенный фуллерен с симметрией пятого порядка.

Способ IX. Соединение двух куполов C_{15} . Совершенный фуллерен. Оба купола имеют симметрию пятого порядка. Полученный фуллерен имеет двенадцать пятиугольников и пять шестиугольников. Полученная структура является совершенным фуллереном с симметрией пятого порядка (рис. 4) [9].

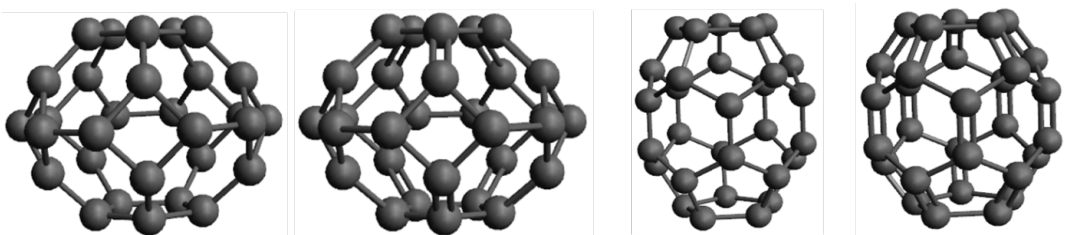


Рис. 4. Слияние разных (способ VIII) и одинаковых (способ IX) куполов

Полученные изомеры и энергия их формирования

Для рассмотренных изомеров были выполнены расчеты энергии с помощью прикладного вычислительного пакета Avogadro. В таблице представлены расчетные значения минимальной энергии для фуллеренов с одинарными связями (E_{\min}) и максимальной энергия для фуллеренов с двойными связями (E_{\max}).

Таблица

Расчетные значения энергии образования изомеров фуллеренов

Химическая формула	Номер способа	Энергия, кДж/моль	
		E_{\min}	E_{\max}
C_{28}	I	924	1790
	II	689	1872
	III	2250	3867
	IV	924	1172
	V	1119	2264
C_{30}	VI	832	847
	VII	689	1872
	VIII	1840	2548
	IX	852	1907

Практически все рассмотренные и представленные в таблице изомеры являются (за исключением сформированных по способу III) совершенными фуллеренами. Анализ полученных результатов показывает, что фуллерены, образованные путем встраивания димера в исходные фуллерены [5], обладают минимальными энергиями (выделены жирным шрифтом). Энергия образования фуллерена возрастает при условии соединения разных или одинаковых куполов. Рассмотренные фуллерены имеют симметрию второго, третьего, пятого и седьмого порядков.

Заключение

Проведенное исследование завершило систематизацию возможных способов образования изомеров фуллеренов в цепочке с химическими формулами от C_{20} до C_{30} , а именно – C_{28} и C_{30} . Такая систематизация позволила получить дополнительные подтверждения в пользу правильности выводов предыдущей работы [10]. Было ранее показано, что энергетически выгодно образование фуллеренов путем встраивания димера в исходный фуллерен. Полученные фуллерены являются совершенными. Исключением является случай, когда исходный фуллерен содержит два дополнительных междоузлия. Такой фуллерен оказывается несовершенным с топологической симметрией, и для его образования необходимы большие энергозатраты.

Полученные результаты позволили углубить понимание особенностей структуры фуллеренов. С практической же точки зрения, эти данные могут быть полезны исследователям при выборе конкретного фуллерена с ориентацией на значение энергии его образования при самых разнообразных разработках.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Melker A. I., Matvienko A. N. Periodic system of fullerenes: isomers from C_{20} to C_{28} // Proceedings of NDTCS-2019: Nano-Design, Technology, Computer Simulations. 24.09.2019 – 27.09.2019. Brest, Belarus. Pp.72–78.
2. Poklonski N. A., Ratkevich S. V., Vyrko S. A. Quantum-chemical calculation of carbododecahedron formation in carbon plasma // The Journal of Physical Chemistry. A. 2015. Vol. 119. No. 34. Pp. 9133–9139.

3. **Sánchez-Bernabe F. J.** Towards a periodic pattern in classical and nonclassical fullerenes with tetrahedral structure // *Materials Physics and Mechanics*. 2020. Vol. 45. No. 1. Pp. 79–86.
4. **Melker A. I., Krupina M. A., Matvienko A. N.** Nucleation and growth of fullerenes and nanotubes having four-fold symmetry // *Materials Physics and Mechanics*. 2021. Vol. 47. No. 2. Pp. 315–343.
5. **Endo M., Kroto H. W.** Formation of carbon nanofibers // *The Journal of Physical Chemistry*. 1992. Vol. 96. No. 17. Pp. 6941–6943.
6. **Schwerdtfeger P., Wirz L. N., Avery J.** The topology of fullerenes // *WIREs Computational Molecular Science*. 2015. Vol. 5. No. 1. Pp. 96–145.
7. **Tunuguntla R. H., Henley R. Y., Yao Y.-C., Pham T. A., Wanunu M., Noy A.** Enhanced water permeability and tunable ion selectivity in subnanometer carbon nanotube porins // *Science*. 2017. Vol. 357. No. 6353. Pp. 792–796.
8. **Amaya T., Natata T., Hirao T.** Synthesis of highly strained π -bowls from sumanene // *Journal of the American Chemical Society*. 2009. Vol. 131. No. 31. Pp. 10810–10811.
9. **Amiri H., Shepard K. L., Nickolls C., Sánchez R. H.** Single-walled carbon nanotubes: Mimics of biological channels // *Nano Letters*. 2017. Vol. 17. No. 2. Pp. 1204–1211.
10. **Матвиенко А. Н.** Способы формирования структуры миди-фуллеренов на примере изомеров C_{22} , C_{24} и C_{26} // *Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки*. 2023. Т. 16. № 1. С. 125–131.

REFERENCES

1. **Melker A. I., Matvienko A. N.**, Periodic system of fullerenes: isomers from C_{20} to C_{28} , In: *Proc. NDTCS-2019: Nano-Design, Technology, Computer Simulations* (24.09.2019 – 27.09.2019. Brest, Belarus) 72–78.
2. **Poklonski N. A., Ratkevich S. V., Vyrko S. A.**, Quantum-chemical calculation of carbododecahedron formation in carbon plasma, *J. Phys. Chem. A*. 119 (34) (2015) 9133–9139.
3. **Sánchez-Bernabe F. J.**, Towards a periodic pattern in classical and nonclassical fullerenes with tetrahedral structure, *Mater. Physic. Mech.* 45 (1) (2020) 79–86.
4. **Melker A. I., Krupina M. A., Matvienko A. N.**, Nucleation and growth of fullerenes and nanotubes having four-fold symmetry, *Mater. Phys. Mech.* 47 (2) (2021) 315–343.
5. **Endo M., Kroto H. W.**, Formation of carbon nanofibers, *J. Phys. Chem.* 96 (17) (1992) 6941–6943.
6. **Schwerdtfeger P., Wirz L. N., Avery J.**, The topology of fullerenes, *WIREs Comput. Mol. Sci.* 5 (1) (2015) 96–145.
7. **Tunuguntla R. H., Henley R. Y., Yao Y.-C., et al.**, Enhanced water permeability and tunable ion selectivity in subnanometer carbon nanotube porins, *Sci.* 357 (6353) (2017) 792–796.
8. **Amaya T., Natata T., Hirao T.**, Synthesis of highly strained π -bowls from sumanene, *J. Am. Chem. Soc.* 131 (31) (2009) 10810–10811.
9. **Amiri H., Shepard K. L., Nickolls C., Sánchez R. H.**, Single-walled carbon nanotubes: Mimics of biological channels, *Nano Lett.* 17 (2) (2017) 1204–1211.
10. **Matvienko A. N.**, The ways to form midi-fullerens structure exemplified by C_{22} , C_{24} and C_{26} isomers, *St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics*. 16 (1) (2023) 125–131 (in Russian).

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРЕ

МАТВИЕНКО Александра Николаевна – ассистент Высшей школы механики и процессов управления; инженер той же школы Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия.

195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29

matvienko_an@spbstu.ru

ORCID: 0000-0002-3012-1407

THE AUTHOR

MATVIENKO Aleksandra N.

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University

29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia

matvienko_an@spbstu.ru

ORCID: 0000-0002-3012-1407

*Статья поступила в редакцию 17.04.2023. Одобрена после рецензирования 29.01.2024.
Принята 29.01.2024.*

Received 17.04.2023. Approved after reviewing 29.01.2024. Accepted 29.01.2024.