

# МОДЕЛИРОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ ЭЛЕКТРИЧЕСКОГО ПОЛЯ НА ЭЛЕКТРОННУЮ СТРУКТУРУ ЭНДОЭДРАЛЬНОГО КОМПЛЕКСА N@C<sub>60</sub>

Тучин А. В., Битюцкая Л. А.

Воронежский государственный университет,  
физический факультет, каф. Физики полупроводников и микроэлектроники,  
Россия, 394006, г. Воронеж, Университетская пл. 1,  
Тел.: (4732)208-481,  
E-mail: [me144@phys.vsu.ru](mailto:me144@phys.vsu.ru)

Устройства на основе фуллеренов и их производных представляют интерес благодаря своим уникальным свойствам и являются перспективными материалами во многих областях науки и техники. Все большее количество статей посвящено применению эндоэдральных комплексов (ЭК) N@C<sub>60</sub> и P@C<sub>60</sub> внедренных в нанотрубку в качестве элементной базы квантового компьютера [1]. Информационное связывание между ЭК осуществляется электрическим полем (ЭП). В связи с этим необходимо изучение влияния ЭП на геометрию, электрические и химические свойства ЭК [2]. Для изучения электронной структуры основных и возбужденных состояний C<sub>60</sub> и N@C<sub>60</sub> применялись расчеты ab initio в программном комплексе Gaussian03. Целью работы является анализ влияния ЭП (E=0...10<sup>8</sup> В/см, E||C<sub>5</sub>) на поляризацию и перераспределение электронной плотности ЭК N@C<sub>60</sub>. Для выбора метода расчетов и базиса проводились расчеты геометрии и полной энергии E<sub>tot</sub> фуллерена. Результаты расчетов методом DFT LSDA в базисе 3-21\*G основного состояния молекулы C<sub>60</sub> (r<sub>c-c</sub> = 1.45 Å, r<sub>c-c</sub> = 1.39 Å, E<sub>tot</sub> = -2260.6 а.е., дипольный момент D<sub>C<sub>60</sub></sub>=0) хорошо согласуются с табличными данными [2, 3]. Оптимизация геометрии основного состояния N@C<sub>60</sub> показала, что минимуму энергии соответствует положение атома N на расстоянии 1.458 Å от середины двойной связи C=C, т.е. на одной из 30 осей C<sub>2</sub> фуллерена C<sub>60</sub>. Зависимости D<sub>C<sub>60</sub></sub> и D<sub>N@C<sub>60</sub></sub> от величины поля являются линейными. Установлено, что вклад в D<sub>N@C<sub>60</sub></sub>, вносимый присутствием атома N, слабо зависит от величины ЭП, а линейная зависимость D<sub>N@C<sub>60</sub></sub> обусловлена поляризацией углеродного скелета. ЭП поле приводит к перераспределению электронной плотности и изменению симметрии молекулярных орбиталей (МО) π-подсистемы фуллерена C<sub>60</sub> [3]. ЭП величиной 5·10<sup>7</sup> В/см приводит к появлению у 171 МО оси C<sub>5</sub> при E||C<sub>5</sub> и оси C<sub>2</sub> при E||C<sub>2</sub>. Анализ перераспределения электронной плотности N@C<sub>60</sub>, вызванного ЭП показал, что при E||C<sub>5</sub> 171 МО обладает осью симметрии C<sub>2</sub>, что обусловлено положением атома азота на оси второго порядка фуллерена C<sub>60</sub>.

## Литература.

1. Yang W. L., Xu Z. Y., et al. Quantum-information-processing architecture with endohedral fullerenes in a carbon nanotube // Phys. Rev. A, V81, 2010, p. 032303-1 – 032303-8.
2. Laszlo Forro and Laszlo Mihaly Electronoc properties of doped fullerenes // Rep. of Prog. In Phys., V64, 2001, p. 649-699.
3. Тучин А. В., Битюцкая Л. А. Поляризация фуллерена C<sub>60</sub> в постоянном электрическом поле // Конд. среды и межфаз. границы, T12 №2, 2010, с. 168-172.