молекулами, подобны воздействию специфического растворителя с необычными свойствами. Систематическое изучение данных явлений может привести к разработке теоретических основ создания новых материалов с практически полезными свойствами.

1. Кузнецов В.В. Теоретическая оценка конформационной предпочтительности молекулы этана в фуллерене C₆₀ // Журнал общей химии – 2013. Т.83. № 6. С.1033-1034.
2. Laikov D.N., Ustynyuk Yu.A. PRIRODA-04: a quantum-chemical program suite. New possibilities in the study of molecular systems with the application of parallel computing // Russian Chemical Bulletin. 2005. V. 54. № 3. P. 820-826.
3. Кузнецов В.В. Конформационные свойства этана и его аналогов в нано-трубках // Российский химический журнал. 2017. Т. 61. № 1. С.37-47.
4. Бочкор С.А., Кузнецов В.В. Действие силового поля нанотрубок на молекулы с кратными связями: структура тетрафторэтена в нанотрубке (4,4) // Научный вестник. 2017. № 2(12). С. 72-78.

Бочкор С.А., Кузнецов В.В.

Катионы в фуллеренах малого диаметра: примеры передачи заряда в эндокомплексе

*Уфимский государственный нефтяной технический университет
Уфимский государственный авиационный технический университет
(Россия, Уфа)*

doi:10.18411/spc-16-01-2018-05

idsp: 000001:spc-16-01-2018-05

Аннотация

В рамках расчетного DFT-приближения PBE/3 ζ на примерах протона и ионов некоторых металлов в фуллеренах малого диаметра исследована степень передачи заряда на инкапсулированную частицу со стороны оболочки наносистемы.

Ключевые слова: фуллерен, инкапсулированный ион, компьютерное моделирование, передача заряда.

Abstract

In the frame of computational DFT approximation PBE/3 ζ using encapsulated proton and ions of some metals in small fullerenes as an example it has been investigated the degree of charge transfer from the wall of nano object to the encapsulated particle.

Keywords: fullerene, encapsulated ion, computer simulation, charge transfer.

Заметный интерес к физико-химическим процессам, происходящим с соединениями внутри фуллеренов и нанотрубок обусловлен активным влиянием последних на строение, электронное состояние и реакционную способность инкапсулированных молекул [1]. В частности, компьютерное моделирование строения нейтральных молекул, химически не связанных с оболочкой наносистемы, показало, что такой субстрат приобретает электрический заряд за счет передачи последнего с оболочки фуллерена либо нанотрубки [2]. Очевидно, в случае инкапсулированной заряженной частицы этот процесс будет проявляться более отчетливо: так заряд оксониевого иона H₃O⁺ в полости фуллерена C₂₀ возрастает почти в семь раз (6.7 элементарного заряда) по сравнению с изолированным ионом [3]. В этой связи целью настоящей работы является изучение влияния природы иона и фуллерена на степень передачи заряда с оболочки наносистемы на инкапсулированную частицу. В качестве объектов исследования были выбраны эндокомплексы однозарядных ионов H⁺, Li⁺ и Na⁺ с фуллеренами C₂₀, Si₇C₁₃ и Si₂₀, а в качестве расчетного приближения – PBE/3 ζ (программный комплекс ПРИРОДА [4]).

На рисунке представлены отдельные исследованные эндокомплексы $X^+@$ фуллерен, а в таблице – значения заряда на инкапсулированном катионе.

Рисунок. Исследованные эндокомплексы $X^+@$ фуллерен

Кроме комплекса $H^+@C_{20}$ катион не реагирует с остовом фуллерена. Полученные результаты свидетельствуют о том, что во всех случаях величина заряда на катионе в эндокомплексе отличается от наблюдаемой для свободной частицы X^+ (+1). Установленные различия определяются как химическим составом фуллерена, так и природой самого катиона.

Заряд на инкапсулированном катионе в эндокомплексе

Эндокомплекс	Величина заряда	$\Delta q (q_{\text{своб.}} - q_{\text{эндо}})$
$H^+@C_{20}$	0.1074	0.8926
$H^+@Si_{20}$	0.0906	0.9094
$Li^+@C_{20}$	0.5712	0.4288
$Na^+@C_{20}$	10.6537	-9.6537
$Li^+@Si_7C_{13}$	-0.0494	1.0494

Значения заряда протона и катиона лития однозначно уменьшаются за счет передачи электронной плотности со стенок фуллерена на инкапсулированную частицу, причем в случае комплекса $Li^+@Si_7C_{13}$ заряд на катионе становится отрицательным ($\Delta q > 1$). Однако при увеличении линейного размера катиона (Na^+) его заряд возрастает более чем в 10 раз, аналогично наблюдаемому для эндокомплекса $H_3O^+@C_{20}$ [3]. По всей видимости, это обусловлено влиянием особенностей несвязанных взаимодействий инкапсулированного катиона с атомами фуллереновой оболочки; дальнейшее исследование последних требует увеличения числа примеров эндокомплексов $X^n+@$ фуллерен, включая многозарядные катионы и фуллерены большего размера.

1. Manzetti S. Molecular and crystal assembly inside the carbon nanotube: encapsulation and manufacturing approaches // *Advances in Manufacturing*. 2013. V. 1. № 3. P. 198-210.
2. Кузнецов В.В. Конформационные свойства этана и его аналогов в нано-трубках // *Российский химический журнал*. 2017. Т. 61. № 1. С. 37-47.
3. Кузнецов В.В. Оксониевый ион в фуллеренах малого диаметра // *Научный вестник* – 2016. - № 4(10). С. 118-125.
4. Laikov D.N., Ustynyuk Yu.A. PRIRODA-04: a quantum-chemical program suite. New possibilities in the study of molecular systems with the application of parallel computing // *Russian Chemical Bulletin*. 2005. V. 54. № 3. P. 820-826.