

УДК 539.194:535.37

DOI: 10.17223/00213411/63/8/76

В.А. ПОМОГАЕВ^{1,2}, Ю.А. МЕЛЬЧАКОВА^{1,2}, П.В. АВРАМОВ²

ЭЛЕКТРОННЫЕ КОРРЕЛЯЦИИ, ЭЛЕКТРОННАЯ И КОЛЕБАТЕЛЬНАЯ СПЕКТРОСКОПИЯ И ДИНАМИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ФУЛЛЕРЕНОВ C₆₀ И C₇₀ И ИХ КОНДЕНСИРОВАННЫХ ФАЗ *

Приводится критический анализ ключевых спектроскопических данных по исследованию структуры и свойств различных молекулярных твердых тел и фаз на основе фуллеренов C₆₀ и C₇₀ и их производных, таких, как эндоэдральные и экзоэдральные комплексы с ионами металлов, водородом, гелием, галогенами, их электронные спектры и спектры магнитного резонанса и, в ряде случаев, динамика атомного остова. Ключевые экспериментальные данные интерпретированы на основе расчетов электронной структуры фуллеренов и их производных.

Ключевые слова: фуллерен C₆₀, фотоэлектронные спектры, рентгеновские спектры, ЯМР, спектры обращенной фотоэмиссии, оптические спектры, инфракрасные спектры, динамика атомного остова.

Колебательные, электронные и магнитные спектры C₆₀ и C₇₀ и их производных

Структура и свойства молекулярного C₆₀ в настоящее время являются хорошо исследованными. Атомная структура этой молекулы наблюдалась методом сканирующей туннельной микроскопии (СТМ) [1–7] для молекул, сорбированных на различных поверхностях, в частности на поверхности Si, Au, Pt, GaAs, других полупроводниках и металлах. Хорошо известно [8], что молекулы фуллеренов образуют твердое тело с гранецентрированной кубической решеткой (фуллерит). При нормальной температуре молекулы C₆₀ вращаются в узлах решетки. Структурная жесткость фуллерита при нормальной температуре не позволяет исследовать атомную и электронную структуру фуллеренов методом прямого наблюдения СТМ, однако любые поверхности металлов и полупроводников, которые характеризуются оборванными связями, образуют достаточно прочные, не ковалентные по своей природе, связи с молекулами фуллеренов, что фиксирует их ориентацию на поверхности твердых тел и гасит молекулярное вращение. Данный эффект наблюдался авторами [4, 7], что позволило не только установить способы координации молекул на многих поверхностях, но и выяснить многие тонкие детали электронной структуры C₆₀. Так, исследование пленок C₆₀ на поверхностях Si показало, что даже отжиг не меняет их структуру из-за ковалентных связей, образующихся между молекулами C₆₀ и релаксированными поверхностями кремния. При анализе электронной структуры, полученной СТМ-методом на подложках, необходимо учитывать, что молекулы фуллеренов часто выступают в роли окислителей многих поверхностей и сами становятся частично отрицательно-заряженными [9–12], что, в свою очередь, изменяет их электронную структуру. Метод СТМ часто дает прямую информацию о взаимодействии адсорбата с подложкой, что важно для понимания механизма роста пленок фуллеренов и их физических и химических свойств.

Инфракрасная (ИК) спектроскопия была первым аналитическим методом, при помощи которого было определено содержание фуллеренов в саже [13–15]. В ИК-спектре поглощения C₆₀ наблюдаются четыре высокоинтенсивные линии с центрами при энергиях 149, 1183, 577 и 528 см⁻¹ и ширинами 3–10 см⁻¹, которые относятся к колебаниям F_{1u}-симметрии. Бедный спектр инфракрасного поглощения фуллеренов является прямым указанием на высокую симметрию этой молекулы, и, в конечном счете, служит неопровержимым доказательством ее структуры. Именно основываясь на весьма специфической форме инфракрасного спектра поглощения C₆₀, и были созданы современные технологии синтеза фуллеренов, которые следовали за попытками усиления двугорбой структуры в ИК-спектрах поглощения пыли. Для чистого по ¹³C линии поглощения фуллерена смещаются в красную область. Результаты теоретического моделирования ИК-спектров C₆₀, полученные в предположении, что структура C₆₀ – это усеченный икосаэдр [16], хорошо согласуются с экспериментальными данными.

* Результаты были получены в рамках выполнения госзадания Минобрнауки России, проект № 0721-2020-0033.

Уважаемые читатели!

Доступ к полнотекстовой версии журнала
«Известия высших учебных заведений. Физика»
осуществляется на платформе
Научной электронной библиотеки eLIBRARY.RU
на платной основе:

<https://elibrary.ru/contents.asp?titleid=7725>