

Р. А. Браже, Л. Р. Шихмуратова

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ СУПРАФУЛЛЕРЕНОВ И СУПРАФУЛЛЕРАНОВ¹

Аннотация.

Актуальность и цели. Полиэдрические молекулы, в том числе фуллерены, рассматриваются как перспективные материалы для использования в строительной индустрии, машиностроении, водородной энергетике, биотехнологиях и медицине. Целью данной работы являются расчеты равновесных геометрических параметров и энергии связи атомов в так называемых супрафуллеренах и супрафуллеранах, отличающихся от классических фуллеренов и фуллеранов более сложным расположением атомов.

Материалы и методы. С помощью программных пакетов NanoEngineer и Abinit вначале находились отвечающие энергетическим минимумам геометрические параметры макромолекулы. Далее на основе теории функционала плотности (DFT) с использованием набора базисных функций 6-311G осуществлялся расчет ее полной энергии и энергии связи, приходящаяся на один атом.

Результаты. Показано, что энергия связи атомов супрафуллеренов соизмерима с таковой для классических фуллеренов C_{20} и C_{60} , а в некоторых из них даже выше. Супрафуллераны характеризуются меньшими энергиями связи атомов и термодинамически менее устойчивы. Вследствие этого полное гидрирование супрафуллеренов затруднительно.

Выводы. Диаметр супрафуллеренов может в 2–3 раза превышать диаметр наиболее распространенного фуллерена C_{60} . Соответственно их объем должен 8–27 раз превышать объем последнего. Это означает, что супрафуллерены могут быть успешно использованы в качестве капсул для радионуклидов в селективной лучевой терапии и других приложениях.

Ключевые слова: полиэдрические молекулы, супрафуллерены, супрафуллераны, равновесные геометрические параметры, лучевая терапия.

R. A. Brazhe, L. R. Shikhmuratova

MATHEMATICAL MODELLING OF SUPRAFULLERENES AND SUPRAFULLERANES

Abstract.

Background. Polyhedral molecules, including fullerenes, are considered as perspective materials to be used in the construction industry, mechanical engineering, hydrogen energetics, biotechnologies and medicine. The purpose of this paper is to calculation equilibrium geometrical parameters and binding energy of atoms in the so-called suprafullerenes and suprafulleranes, differing from classical fullerenes and fulleranes by more complex arrangement of atoms.

Materials and methods. By means of NanoEngineer and Abinit software packages in the beginning the authors obtained geometrical parameters of a macromolecule meeting energy minima. After that, on the basis of the density functional theory (DFT) using basic functions of 6-311G set the researchers calculated its total energy and binding energy per atom.

¹ Работа выполнена при финансовой поддержке ФЦП «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России» на 2009 – 2013 годы (соглашение № 14.B37.21.1083)

Results. It is shown that the binding energy of suprafullerenes atoms is commensurable with that for classical C_{20} and C_{60} fullerenes, and in some of them even is higher. Suprafullerenes are characterized by smaller binding energy of their atoms and are less steady thermodynamically. Therefore the complete hydrogenation of suprafullerenes encounters certain difficulties.

Conclusions. Suprafullerenes' diameter can exceed the diameter of the most widespread C_{60} fullerene 2–3 times. Respectively their volume has to exceed the volume of the latter 8–27 times. It means that suprafullerenes can be successfully used as capsules for radionuclides in selective beam therapy and other applications.

Key words: polyhedral molecules, suprafullerenes, suprafullerenes, equilibrium geometrical parameters, beam therapy.

Введение

Фуллерены являются частным случаем полиэдрических молекул (полиэдренов), каркасы которых образуют правильные (платоновы) или полуправильные (архимедовы) тела. Так, например, фуллерен C_{20} имеет форму додекаэдра [1], а фуллерен C_{60} – усеченного икосаэдра [2]. Существуют, синтезированы или теоретически предсказаны и другие полиэдрены подобного типа: тетраэдрен P_4 (белый фосфор) [3], кубен C_8 [4], а также гидриды полиэдренов – полиэдры: тетраэдран C_4H_4 [5], кубан C_8H_8 [6], додекаэдран $C_{20}H_{20}$ [7], фуллеран $C_{60}H_{60}$ [8] и др. Фуллереноподобные и фуллераноподобные макромолекулы интересны как сами по себе, так и в качестве «строительных кирпичиков», позволяющих создавать из них новые классы наноматериалов с необычными физико-химическими свойствами [8].

Как доказано математиками, существуют лишь 5 платоновых и 13 архимедовых тел [9], получаемых усечением платоновых тел. Дальнейшее усечение архимедовых тел приводит к выпуклым многогранникам, содержащим не вполне правильные многогранники в качестве сторон. Тем не менее, если отсекать определенным образом вершины и ребра усеченного икосаэдра, можно получить почти правильные многогранники с ребрами равной длины. Если расположить в вершинах таких многогранников атомы, то можно заметить, что полученные таким образом атомные кластеры представляют собой обобщения классического фуллерена C_{60} . Вместо одного атома мы получаем симметрично организованные атомные комплексы. По аналогии с предложенными нами ранее супракристаллами [10, 11] мы назвали такие молекулы супрафуллеренами.

Целью настоящей работы является построение атомных моделей супрафуллеренов, нахождение геометрических параметров их термодинамически равновесной конфигурации, определение устойчивости существования при комнатной температуре и численные расчеты энергии связи образующих их атомов.

Атомные модели

На рис. 1 показаны способы усечения углов и ребер усеченного икосаэдра с образованием различных типов дважды усеченного икосаэдра, в вершинах которых могут находиться атомы супрафуллеренов.

На рис. 2 показаны атомные модели супрафуллеренов и супрафуллеранов, соответствующих рис. 1. В качестве их образующих использованы атомы подходящей валентности: бор (В) и углерод (С). Во втором случае четвертый валентный электрон, не участвующий в создании σ -связей с соседними

атомами углерода, может быть связан с атомом водорода (H) путем гидрирования супрафуллерена до образования супрафуллерана. Однако он может образовывать и двойные связи с соседними атомами. В этом случае грани супрафуллерена получают гетероциклическими. Изображены только те макромолекулы, которые согласно нашим расчетам оказались хотя бы метастабильно термодинамически устойчивыми.

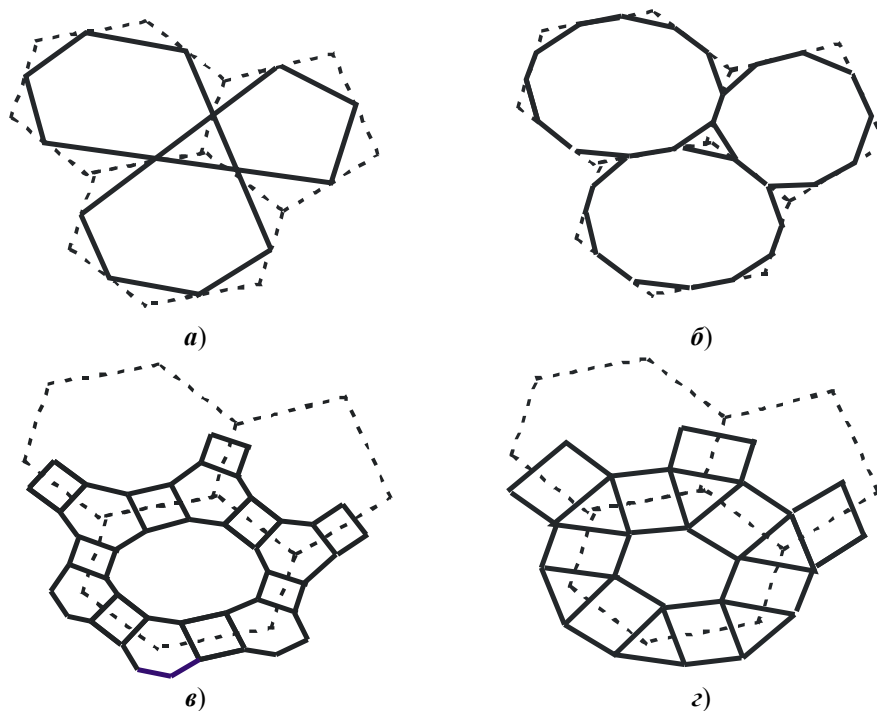


Рис. 1. Форма граней возможных типов супрафуллеренов: $X_{90}(3,5,6)$ (а), $X_{180}(3,10,12)$ (б), $X_{360}(6,4,10,12)$ (в), $X_{180}(3,4,5,6)$ (з). Числа в скобках указывают вид многогранников, являющихся гранями супрафуллерена. Нижние индексы соответствуют числу атомов типа X в макромолекуле

Методика расчетов

На первом этапе работы исследуемая атомная модель сводилась к оптимальной с энергетической точки зрения конфигурации с помощью программного пакета NanoEngineer. Затем полученные координаты атомов вводились в пакет Abinit и проводилась повторная оптимизация геометрических параметров молекулы. Далее на основе теории функционала плотности (DFT) с использованием набора базисных функций 6-311G осуществлялся расчет диаметра молекулы, ее полной энергии, отвечающих данному локальному энергетическому минимуму, и длины связей.

Отметим, что согласно нашим расчетам полиэдрические молекулы из атомов B и C, соответствующие рис. 1, а, з, характеризуются отрицательными значениями энергии связи и, стало быть, не могут образовывать устойчивые системы. В рамках нашей модели это означает, что данные атомные конфигурации соответствуют не локальным минимумам полной энергии системы, а ее локальным максимумам (седловым точкам). Действительно, отрицатель-

ность энергии связи означает, что полная энергия данной атомной модели больше, чем суммарная энергия входящих в нее атомов, т.е. она не устойчива и должна распадаться.

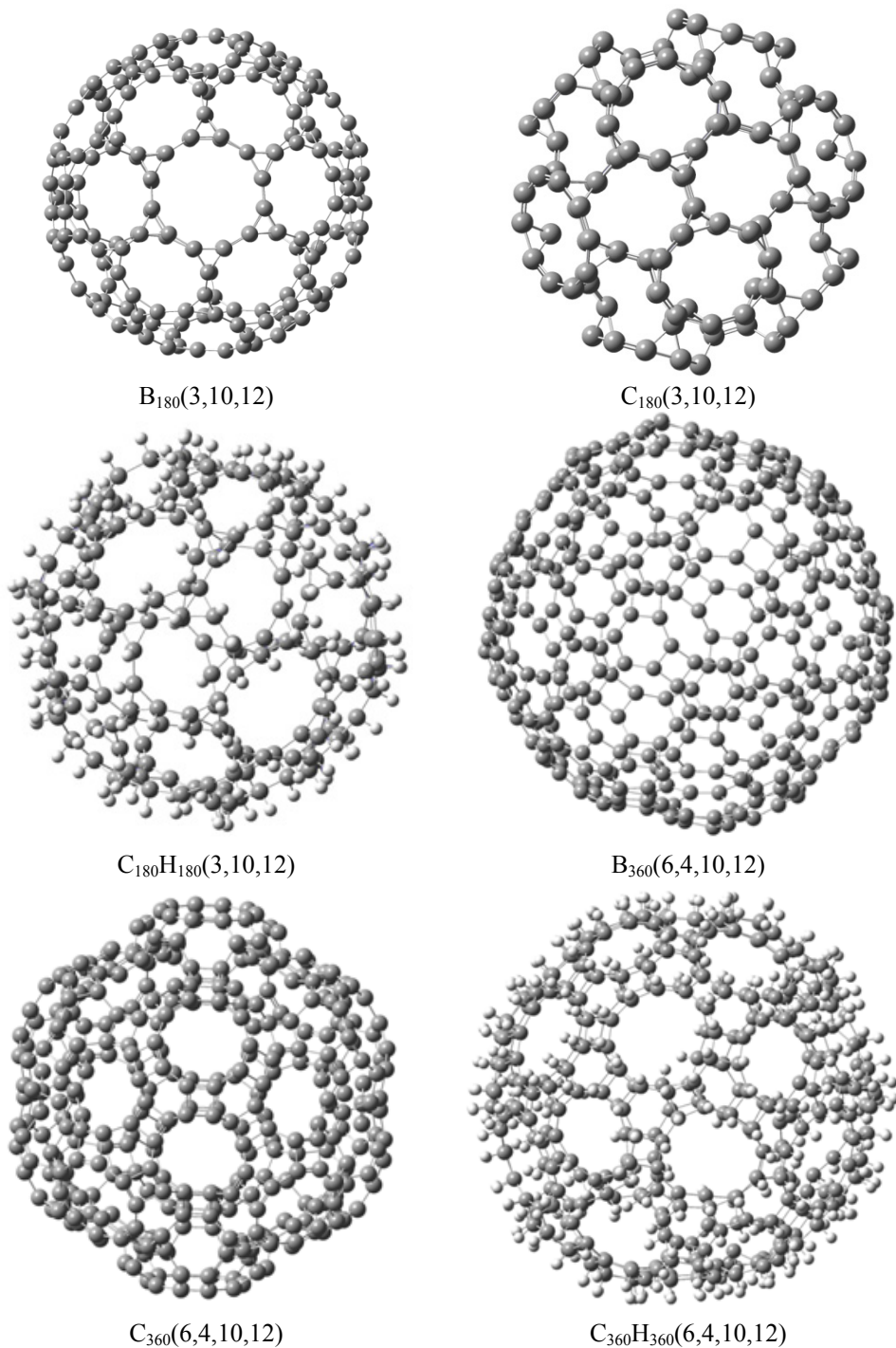


Рис. 2. Атомные модели термодинамически устойчивых супрафуллеренов и супрафуллеранов

Точность расчета определяется набором базисных функций и подбором значения энергии отсечения. Вычисление матриц Якоби, необходимое при расчете полной энергии равновесного состояния атомного кластера, зачастую невозможно в чистом виде. Для расчета таких матриц часто используются квазиньютоновы методы приближенных вычислений. В данной программе реализован метод Бройдена многомерного использования метода секущих.

На заключительной стадии расчетов находилась энергия связи, приходящаяся на один атом.

В случае супрафуллеренов полная энергия связи атомного кластера равна

$$E_b = N_X E_X - E_t, \quad (1)$$

где N_X – число атомов (типа X) в кластере; E_X – полная энергия изолированного атома; E_t – полная энергия молекулы. Энергии изолированных атомов также вычислялись в пакете Abinit на основе DFT и того же самого набора базисных функций. Нами были получены следующие их значения, округленные до пяти значащих цифр: $E_b = -667,15$ эВ, $E_C = -1022,4$ эВ.

Энергия связи, приходящаяся на один атом, может быть вычислена как

$$E_{Xa} = \frac{N_{b/a}}{N_b} E_b, \quad (2)$$

где $N_{b/a}$ – число связей, приходящихся на один атом; N_b – полное число связей в молекуле.

В случае супрафуллеранов

$$E_b = N_X E_X + N_H E_H - E_t, \quad (3)$$

где N_H – число атомов водорода в молекуле; $E_H = -13,53$ эВ – энергия изолированного атома водорода.

Энергии, приходящиеся на один атом:

$$E_{Ha} = \frac{E_b}{\eta \frac{N_{XX}}{N_{XX/a}} + \frac{N_{XH}}{N_{XH/a}}}, \quad E_{Xa} = \eta E_{Ha}. \quad (4)$$

Здесь N_{XX} – число связей атомов X с X; N_{XH} – число связей атомов X с H; $N_{XX/a}$ – число связей типа XX на один атом; $N_{XH/a}$ – число связей типа XH на один атом; E_{Xa} , E_{Ha} – энергии, приходящиеся на один атом X или H соответственно. Величина η , характеризующая распределение энергии между атомами X и H, может быть приближенно оценена [12] как

$$\eta \approx \frac{M_t - m_X}{M_t - m_H}, \quad (5)$$

где M_t – полная масса молекулы (кластера); m_X – масса атома X; m_H – масса атома водорода.

Результаты и их обсуждение

Для достоверности полученных результатов разработанная нами методика расчетов была предварительно апробирована для известных полиэдрических молекул (см. табл. 1, 2) при этом полученные результаты оказались близки к соответствующим результатам других авторов, использовавших иные методы расчета или полученных экспериментально.

Таблица 1

Длины связей l (Å) в некоторых полиэдрических молекулах

Метод расчета	C ₄ H ₄		C ₈ H ₈		C ₂₀		C ₆₀	
	l_{C-C}	l_{C-H}	l_{C-C}	l_{C-H}	l_{C-C}	l_{C-H}	l_{C-C}	l_{C-H}
Настоящая работа	1,54	1,07	1,58	1,08	1,46	1,34	1,40	1,38
TB [13]	1,53	1,07	—	—	—	—	—	—
TB [14]	—	—	—	—	1,52	1,44	—	—
HF [15]	—	—	—	—	1,47	1,42	—	—
MNDO [16]	—	—	—	—	1,52	1,41	—	—
Tersoff [17]	—	—	—	—	1,53	1,44	—	—
TB [18]	—	—	1,57	1,08	—	—	—	—
B3LYP [5]	1,48	1,07	—	—	—	—	—	—
LDA [19]	—	—	1,59–1,62	1,07–1,11	—	—	—	—
Эксперимент	—	—	1,56 [20]	1,10 [20]	—	—	1,44 [21]	1,39 [21]

Примечание. Длины связей l (Å) в некоторых полиэдрических молекулах рассчитаны различными методами: TB (метод сильной связи), HF (метод Хартри – Фока), MNDO (метод модифицированного пренебрежения дифференцируемым перекрытием), Tersoff (метод Терзофа – Бреннера), B3LYP (гибридный метод функционала плотности, в котором обменная энергия рассчитывается на основе метода Хартри – Фока), LDA (метод функционала плотности в приближении локальной плотности) или полученные экспериментально.

Таблица 2

Энергии связи E_a (эВ/атом) некоторых полиэдрических молекул

Метод расчета	C ₄ H ₄ (T)		C ₈ H ₈ (C)		C ₂₀ (D)	C ₆₀ (TI)
	E_{Ca}	E_{Ha}	E_{Ca}	E_{Ha}	E_{Ca}	E_{Ca}
Настоящая работа	2,40	3,05	5,11	5,72	4,71	6,80
TB [13]	3,90	3,90	—	—	—	—
TB [14]	—	—	—	—	6,08	—
TB [22]	—	—	—	—	6,08	—
HF [23]	—	—	—	—	4,01	—
LDA [23]	—	—	—	—	7,95	—
GCA [24]	—	—	—	—	6,36	—
Tersoff [17]	—	—	—	—	6,36	—
TB [18]	—	—	4,42	4,42	—	—
Эксперимент	—	—	4,47 [18]	4,47 [18]	—	7,0 [25]

Примечание. Энергии связи E_a (эВ/атом) некоторых полиэдрических молекул рассчитаны различными методами: TB (метод сильной связи), HF (метод Хартри – Фока), LDA (метод функционала плотности в приближении локальной плотности), GCA (метод функционала плотности с учетом градиентных поправок), Tersoff (метод Терзофа – Бреннера), или полученные экспериментально.

Следует обратить внимание на то, что в сопоставляемых с нашими данными значениях энергии связи атомов водорода имеются различия с цитируемыми работами, так как в этих работах она находилась упрощенным способом, без учета различий между атомами водорода и углерода.

В табл. 3 представлены результаты расчета длины l (Å) межатомных связей, диаметра D (нм) исследуемых супрафуллеренов и супрафуллеранов, их полной энергии E_t (кэВ) и энергии связи атомов E_{Xa} и E_{Ha} (эВ/атом).

Таблица 3

Геометрические и энергетические характеристики
супрафуллеренов и супрафуллеранов

Молекула	l_{X-X}	$l_{X=X}$	l_{X-H}	D	E_t	E_{Xa}	E_{Ha}
$B_{180}(3,10,12)$	1,74	—	—	1,64	–121036	5,27	—
$C_{180}(3,10,12)$	1,46	1,34	—	1,35	–185305,8	7,1	—
$C_{180}H_{180}(3,10,12)$	1,57	—	1,07	1,81	–187138,2	1,24	1,25
$B_{360}(6,4,10,12)$	1,78	—	—	2,17	–242021	5,13	—
$C_{360}(6,4,10,12)$	1,49	1,34	—	1,85	–372589	12,6	—
$C_{360}H_{360}(6,4,10,12)$	1,56	—	1,07	1,99	–375843	2,691	2,698

Как видно из табл. 3, энергия связи атомов супрафуллеренов соизмерима с таковой для классических фуллеренов C_{20} и C_{60} , а в супрафуллеране $C_{360}(6,4,10,12)$ даже существенно выше. Видно также, что энергия связи атомов углерода выше, если в супрафуллеранах присутствуют двойные связи. Супрафуллераны характеризуются меньшими энергиями связи атомов и термодинамически менее устойчивы. Вследствие этого полное гидрирование супрафуллеренов затруднительно.

Видно также, что диаметр супрафуллеренов может в 2–3 раза превышать диаметр наиболее распространенного фуллерена C_{60} . Соответственно их объем должен 8–27 раз превышать объем последнего. Это означает, что супрафуллерены могут быть успешно использованы в качестве капсул для радионуклидов в селективной лучевой терапии. Использование супрафуллеренов наряду с классическими фуллеренами в традиционно упоминаемых объектах: строительной индустрии, машиностроении, водородной энергетике, биотехнологиях и медицине, по-видимому, также возможно.

Список литературы

1. Gas – phase production and photoelectron spectroscopy of the smallest fullerene, $C_{20}H_{20}$ / H. Prinzbach, A. Weller, P. Landenberger, F. Wahl, T. Worth, L.T. Scott, M. Gelmont, D. Olevano, B. von Issendorf // Nature. – 2000. – Vol. 407. – P. 60–63.
2. C_{60} : Buckminsterfullerene / H. W. Kroto, J. R. Heath, S. C. O'Brien, R. F. Curl, R. E. Smalley // Nature. – 1985. – Vol. 318. – P. 6042.
3. Реми, Г. Курс неорганической химии. Т. I / Г. Реми. – М.: Мир, 1972. – 824 с.
4. Openov, L. A. Prismane C_8 – A new form of carbon? / L. A. Openov, V. F. Elesin // Phys. Let. A. – 2009. – Vol. 373. – P. 1653–1657.
5. Jursic, B. S. Theoretical study of structural properties, infrared spectra, and energetic properties of C_4H_4 isomer / B. S. Jursic // J. mol. Structure (Theochem). – 2000. – Vol. 507. – P. 185–192.
6. Elaton, P. E. The Cuban system / P. E. Elaton, T. W. Cole // J. Am. Chem. Soc. – 1964. – Vol. 86. – P. 962–964.

7. **Paquette, L. A.** Total synthesis of dodecahedrane / L. A. Paquette, R. J. Ternansky, D. W. Balogh, G. Kentgen // *Am. Chem. Soc.* – 1983. – Vol. 105. – P. 5446–5450.
8. **Berland, K.** Structure and binding in crystals of cage-like molecules: Hexamin and platonic hydrocarbons / K. Berland, P. Hyldgaard // *J. Chem. Phys.* – 2010. – Vol. 132. – P. 134705-1–134705-10.
9. **Веннинджер, М.** Модели многогранников / М. Веннинджер. – М. : Мир, 1987. – 236 с.
10. **Браже, Р. А.** Компьютерное моделирование физических свойств супракристаллов / Р. А. Браже, А. А. Каренин // *Известия высших учебных заведений. Поволжский регион. Физико-математические науки.* – 2011. – № 2 (18). – С. 105–112.
11. **Браже, Р. А.** Физика супракристаллов / Р. А. Браже. – Ульяновск : УлГТУ, 2012. – 162 с.
12. **Опенев, Л. А.** Нарушение теоремы о равномерном распределении в теплоизолированных кластерах и атомах с разными массами / Л. А. Опенев, А. И. Подливаев // *Физика твердого тела.* – 2008. – Т. 50, № 6. – С. 1146–1150.
13. **Маслов, М. М.** Термическая устойчивость молекулы тетраэдрана C_4H_4 / М. М. Маслов, Л. А. Опенев // *Научная сессия МИФИ – 2010 : сб. науч. тр. Ч. 1.* – Москва : Изд-во МИФИ, 2010. – С. 157–158.
14. **Давыдов, И. В.** Аномальная термическая устойчивость метастабильного фуллерена C_{20} / И. В. Давыдов, А. И. Подливаев, Л. А. Опенев // *Физика твердого тела.* – 2005. – Т. 47, № 4. – С. 751–757.
15. **Parasuk, V.** C_{20} : the smallest fullerene? / V. Parasuk, J. A. Almlöf // *Chem. Phys. Lett.* – 1991. – Vol. 184, № 1–3. – P. 184–187.
16. **Bakowies, D.** MNDO study of large carbon clusters / D. Bakowies, W. Thiel. // *J. Am. Chem. Soc.* – 1991. – Vol. 113, № 10. – P. 3704–3714.
17. **Du, A. J.** Memory effect in the deposition of C_{20} fullerenes on a diamond surface / A. J. Du, Z. Y. Pan, Y. K. Ho, Z. Huang, Z. X. Zhang // *Phys. Rev. B.* – 2002. – Vol. 66, № 3. – P. 035405.
18. **Маслов, М. М.** Термическая устойчивость кубана C_8H_8 / М. М. Маслов, Д. А. Лобанов, А. И. Подливаев, Л. А. Опенев // *Физика твердого тела.* – 2009. – Т. 51, № 3. – С. 609–612.
19. **Richardson, S. L.** Abinitio studies of the structural and electronic properties of solid cubane // S. L. Richardson, J. L. Martins // *Phys. Rev. B.* – 1998. – Vol. 58, № 23. – P. 15301-1–15307-3.
20. **Hedberg, L.** Bond length and quadratic force field for cubane / L. Hedberg, K. K. Hedberg, P. Eaton, N. Nodari, A. G. Robbette // *J. Am. Chem. Soc.* – 1991. – Vol. 113, № 5. – P. 1514–1517.
21. **Белоусов, В. П.** Фуллерены: структурирование, физико-химические и нелинейно-оптические свойства / В. П. Белоусов, И. М. Белоусова, В. В. Данилов, О. Б. Данилов, А. Г. Калинин, А. А. Мак // *Оптический журнал.* – 1997. – Т. 64, № 12. – С. 3–17.
22. **Tomanek, D.** Growth regimes of carbon clusters / D. Tomanek, M. A. Schluter // *Phys. Rev. Lett.* – 1991. – Vol. 67, № 17. – P. 2331–2334.
23. *Phys. Rev. Lett.* – 1995. – Vol. 75, № 21. – P. 3870–3880.
24. **Jones, R. O.** Structure and bonding in carbon structures C_{14} to C_{24} : Chains, rings, bowls, plates, and cages / R. O. Jones, G. Seifert // *Phys. Rev. Lett.* – 1997. – Vol. 79, № 3. – P. 443–446.
25. **Hebard, A. F.** Buckminsterfullerene / A. F. Hebard // *Annu. Rev. Mater. Sci.* – 1993. – Vol. 23. – P. 159–191.

References

1. Prinzbach H., Weller A., Landenberger P., Wahl F., Worth T., Scott L.T., Gelmont M., Olevano D., von Issendorf B. *Nature*. 2000, vol. 407, pp. 60–63.
2. Kroto H. W., Heath J. R., O'Brien S. C., Curl R. F., Smalley R. E. *Nature*. 1985, vol. 318, p. 6042.
3. Remi G. *Kurs neorganicheskoy khimii. T. I.* [Course of inorganic chemistry. Volume 1]. Moscow: Mir, 1972, 824 p.
4. Openov L. A., Elesin V. F. *Phys. Lett. A*. 2009, vol. 373, pp. 1653–1657.
5. Jursic B. S. *J. mol. Structure (Theochem)*. 2000, vol. 507, pp. 185–192.
6. Elaton P. E., Cole T. W. *J. Am. Chem. Soc.* 1964, vol. 86, pp. 962–964.
7. Paquette L. A., Ternansky R. J., Balogh D. W., Kentgen G. *Am. Chem. Soc.* 1983, vol. 105, pp. 5446–5450.
8. Berland K., Hyldgaard P. *J. Chem. Phys.* 2010, vol. 132, pp. 134705-1–134705-10.
9. Vennindzher M. *Modeli mnogogrannikov* [Models of polyhedrons]. Moscow: Mir, 1987, 236 p.
10. Brazhe R. A., Karenin A. A. *Izvestiya vysshikh uchebnykh zavedeniy. Povolzhskiy region. Fiziko-matematicheskie nauki* [University proceedings. Volga region. Physical and mathematical sciences]. 2011, vol. 18, no. 2, pp. 105–112.
11. Brazhe R. A. *Fizika suprakristallov* [Physics of supracrystals]. Ulyanovsk: UIGTU, 2012, 162 p.
12. Openov L. A., Podlivaev A. I. *FTT*. 2008, vol. 50, no. 6, pp. 1146–1150.
13. Maslov M. M., Openov L. A. *Nauchnaya sessiya MIFI – 2010. Sbornik nauchnykh trudov. Ch. 1* [Scientific session at MFI – 2010. Proceedings. Part 1: XIII International telecommunication conference of students and young scientists]. Moscow: MIFI, 2010, pp. 157–158.
14. Davydov I. V., Podlivaev A. I., Openov L. A. *FTT*. 2005, vol. 47, no. 4, pp. 751–757.
15. Parasuk V., Almlof J. A. *Chem. Phys. Lett.* 1991, vol. 184, no. 1–3, pp. 184–187.
16. Bakowies D., Thiel W. *J. Am. Chem. Soc.* 1991, vol. 113, no. 10, pp. 3704 – 3714.
17. Du A. J., Pan Z. Y., Ho Y. K., Huang Z., Zhang Z. X. *Phys. Rev. B*. 2002, vol. 66, no. 3, p. 035405.
18. Maslov M. M., Lobanov D. A., Podlivaev A. I., Openov L. A. *FTT*. 2009, vol. 51, no. 3, pp. 609–612.
19. Richardson S. L., Martins J. L. *Phys. Rev. B*. 1998, vol. 58, no. 23, pp. 15301-1–15307-3.
20. Hedberg L., Hedberg K. K., Eaton P., Nodari N., Robbette A. G. *J. Am. Chem. Soc.* 1991, vol. 113, no. 5, pp. 1514–1517.
21. Belousov V. P., Belousova I. M., Danilov V. V., Danilov O. B., Kalintsev A. G., Mak A. A. *Opticheskiy zhurnal* [Optical journal]. 1997, vol. 64, no. 12, pp. 3–17.
22. Tomanek D., Sshluter M. A. *Phys. Rev. Lett.* 1991, vol. 67, no. 17, pp. 2331–2334.
23. Grossman J. C., Mitas L., Raghachari K. *Phys. Rev. Lett.* 1995, vol. 75, no. 21, pp. 3870–3880.
24. Jones R. O., Seifert G. *Phys. Rev. Lett.* 1997, vol. 79, no. 3, pp. 443–446.
25. Hebard A. F. *Annu. Rev. Mater. Sci.* 1993, vol. 23, pp. 159–191.

Браже Рудольф Александрович

доктор физико-математических наук,
профессор, заведующий кафедрой
физики, Ульяновский государственный
технический университет (Россия,
г. Ульяновск, ул. Северный Венец, 32)

Brazhe Rudol'f Aleksandrovich

Doctor of physical and mathematical
sciences, professor, head of sub-department
of physics, Ulyanovsk State Technical
University (32 Severny Venetz street,
Ulyanovsk, Russia)

E-mail: brazhe@ulstu.ru

Шихмуратова Люция Решитовна

аспирант, Ульяновский государственный
технический университет (Россия,
г. Ульяновск, ул. Северный Венец, 32)

E-mail: levi.87@inbox.ru

Shikhmuratova Lyutsiya Reshitovna

Postgraduate student, Ulyanovsk State
Technical University (32 Severny Venetz
street, Ulyanovsk, Russia)

УДК 517.958: 530.145

Браже, Р. А.

Математическое моделирование супрафуллеренов и супрафуллеранов / Р. А. Браже, Л. Р. Шихмуратова // Известия высших учебных заведений. Поволжский регион. Физико-математические науки. – 2014. – № 2 (30). – С. 159–168.