

## Энергия деформируемых и дефектных углеродных кластеров

© А.Е. Романов, А.Г. Шейнерман\*

Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе Российской академии наук,  
194021 Санкт-Петербург, Россия

\* Институт проблем машиноведения Российской академии наук,  
199178 Санкт-Петербург, Россия

E-mail: alexei@romanov.ioffe.rssi.ru

(Поступила в Редакцию 1 февраля 2000 г.)

В работе предложен метод расчета энергии деформированных сферических и цилиндрических углеродных кластеров нанометрового размера. Для демонстрации метода рассчитана упругая энергия сферического кластера, деформированного в результате внедрения в него двух типов дефектов — дисклинации или центра дилатации. Показано, что энергия дефекта в оболочке кластера зависит от кривизны ее поверхности, а также что сферическая форма бездефектной оболочки является устойчивой.

Настоящая работа выполнена в рамках научно-технической программы "Фуллерены и атомные кластеры" (проект 98065 "кластер") и при частичной поддержке Российского научного совета "Физика твердотельных наноструктур" (проект 97-3006).

К наиболее распространенным методам расчета энергии углеродных кластеров и определения их равновесных конфигураций относится их квантово-химическое и молекулярно-динамическое моделирование [1–4]. Недавно для расчета энергии кластеров был предложен аналитический метод [5,6], предполагающий, что кластеры образуются из фрагментов графитового монослоя путем искривления их поверхности, но без ее деформации, т.е. без изменения длины связей между атомами этих фрагментов. Внедрение в кластеры дефектов, например вакансионных скоплений, а также внешнее механическое воздействие могут привести к изгибу кластеров, их деформации и образованию новых стабильных конфигураций кластеров.

Первоначальная идея исследования дефектов в углеродных кластерах методами континуальной механики была высказана в работе [7], в которой для расчета энергии кластеров с дефектами предлагалось применить теорию тонких оболочек. Однако, как мы убедились, теория тонких оболочек для описания углеродных кластеров не подходит, поскольку она описывает трехмерную изотропную упругую среду, в то время как кластеры состоят из одной или нескольких двумерных монослойных оболочек. В данной работе предлагается континуальная модель больших (однослойных и многослойных) углеродных кластеров, каждый слой (оболочка) которых включает не менее нескольких тысяч атомов. Примерами таких кластеров служат углеродные нанотрубки и многослойные сферические углеродные кластеры ("луковицы"). Для расчета энергии оболочек мы предлагаем комбинацию линейной теории упругости, учитывающей деформацию оболочек, и метода [5,6], учитывающего их кривизну. В рамках модели каждая оболочка кластера представлена как сплошная двумерная изотропная упругая среда, характеризуемая четырьмя параметрами: модулем сдвига  $G$ , коэффици-

ентом Пуассона  $\nu$  и двумя главными кривизнами поверхности  $K_1$  и  $K_2$ . Взаимодействие между соседними оболочками описывается упругими силами, зависящими от расстояния между этими оболочками. Такое представление лучше всего подходит для оболочек идеализированных незамкнутых углеродных нанотрубок — двумерных кристаллов, выложенных правильными шестиугольниками. В отличие от поверхностей незамкнутых оболочек поверхности замкнутых слоев углеродных кластеров выложены как шестиугольниками, так и пятиугольниками, которые можно трактовать как области поверхности с упругими характеристиками, отличающимися от упругих характеристик основного (гексагонального) слоя материала. Предполагаем, что в исследуемых нами оболочках больших размеров часть поверхности, занимаемая пятиугольниками, мала по сравнению со всей поверхностью оболочки. Поэтому при расчете энергии деформированной оболочки упругие постоянные, характеризующие пятиугольники, мы полагаем равными соответствующим постоянным гексагонального слоя.

В качестве иллюстрации предлагаемого общего метода в настоящей работе приводится расчет упругой энергии, связанной с образованием в однослойном сферическом углеродном кластере центра дилатации или дисклинации. Под дисклинацией в оболочке сферического кластера будем понимать дефект, связанный либо с удалением сектора из этой оболочки и последующим соединением краев разреза, либо с внедрением в нее сектора. В других работах [7–10] дисклинации связывают с наличием пятизвенных колец. В замкнутых оболочках углеродных кластеров число этих пятизвенных колец равно 12, а сами пятизвенные кольца являются дефектами, внутренне присущими углеродным кластерам. В настоящей работе мы вводим дисклинацию в уже сформированный углеродный кластер.

## 1. Метод расчета упругой энергии деформированных кластеров

Для расчета энергии деформированных углеродных кластеров представим дополнительную упругую энергию, запасаемую в результате деформации, в виде суммы двух слагаемых. Первое из этих слагаемых, связанное с растяжением–сжатием оболочек и изменением расстояния между ними, вычислим с помощью линейной теории упругости. Второе слагаемое, связанное с изменением главных кривизн поверхности, рассчитаем с помощью аналитического метода, предложенного в [5,6].

Авторы [5,6] предположили, что энергия  $E_{\text{curv}}^{\text{bond}}$ , связанная с кривизной связи между атомами шестиугольников на поверхности искривленного графитового монослоя, пропорциональна квадрату угла  $\theta$  между направлением связи и тем направлением, которое связь имела бы в плоскости (рис. 1),

$$E_{\text{curv}}^{\text{bond}} = E_c \theta^2, \quad (1)$$

где  $E_c = 0.9 \text{ eV}$  — феноменологический параметр, определенный из согласования с результатами независимого компьютерного моделирования. Для случая  $b/R \ll 1$ , соответствующего малой нормальной кривизне  $1/R$  поверхности оболочки углеродного кластера в направлении, соединяющем два атома шестиугольника с межатомным расстоянием  $b = 0.14 \text{ nm}$ , выполняется приближенное равенство  $\theta \approx b/R$ .

Энергия кривизны связей, приходящаяся на один атом шестиугольника, равна [5,6]

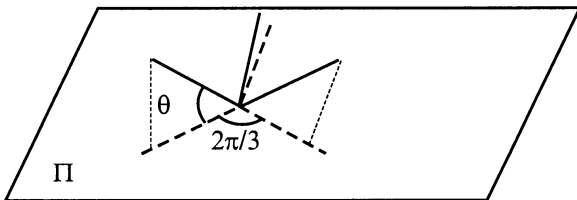
$$E_{\text{at}}^{\text{curv}} = 1/2 E_c b^2 [3/4(K_1 + K_2)^2 + 3/8(K_1 - K_2)^2], \quad (2)$$

где  $K_1$  и  $K_2$  — главные кривизны поверхности.

Используя это выражение и предполагая, что оболочка кластера выложена исключительно шестиугольниками, перейдем к непрерывному распределению связанной с кривизной энергии по поверхности оболочки. Выражение для поверхностной плотности энергии кривизны имеет вид

$$w^{\text{curv}} = \frac{E_{\text{at}}^{\text{curv}}}{S_{\text{at}}} = 3/8 D [2(K_1 + K_2)^2 + (K_1 - K_2)^2], \quad (3)$$

где  $S_{\text{at}} = 3\sqrt{3}b^2/4$  — площадь, приходящаяся на один атом монослоя графита, а  $D = (2/(3\sqrt{3}))E_c$ .



**Рис. 1.** Искривление межатомных связей в углеродном кластере. Направления трех межатомных связей, образуемых атомом  $A$  на искривленной поверхности, показаны сплошными линиями, а проекции направлений этих связей на плоскость  $\Pi$ , в которой все углы между проекциями равны, показаны штриховыми линиями.

К бездефектной оболочке, т.е. оболочке с замкнутой и гладкой поверхностью, применим теорему Гаусса–Бонне [11]

$$\int_S K_1 K_2 d\sigma = 2\pi\chi. \quad (4)$$

В формуле (4)  $S$  — поверхность оболочки,  $\sigma$  — параметр интегрирования, а  $\chi$  — эйлерова характеристика поверхности; для любой поверхности, которая может быть деформирована в сферу,  $\chi = 2$ . В совокупности с формулой (3) эта теорема дает возможность представить энергию кривизны  $E^0$  оболочки бездефектного кластера в виде

$$E^0 = \int_S w^{\text{curv}} d\sigma = 3/8 D \left( 3 \int_S (K_1 - K_2)^2 d\sigma + 16\pi\chi \right). \quad (5)$$

Из последнего равенства следует, что среди всех поверхностей, которые могут быть деформированы в сферу, минимальной энергией обладает поверхность с тождественно равными главными кривизнами ( $K_1 = K_2$ ). Нормальные кривизны такой поверхности равны во всех направлениях, т.е. поверхность является сферой.

Выражение для поверхностной плотности  $w^s$  энергии растяжения–сжатия оболочки в линейной теории упругости имеет вид [12]

$$w^s = \frac{Gh}{1-\nu} [(\varepsilon_1)^2 + (\varepsilon_2)^2 + 2\nu\varepsilon_1\varepsilon_2 + 2(1-\nu)\varepsilon_{12}^2], \quad (6)$$

где  $G$  и  $\nu$  — соответственно модуль сдвига и коэффициент Пуассона базовых плоскостей графита,  $h = 0.34 \text{ nm}$  — расстояние между его базовыми плоскостями, а  $\varepsilon_1$ ,  $\varepsilon_2$  и  $\varepsilon_{12}$  — деформации этих плоскостей.

Упругая энергия взаимодействия данной оболочки с другими может быть рассчитана по формуле

$$w^{\text{int}} = p(\varepsilon)\varepsilon, \quad (7)$$

где  $\varepsilon = (\Delta h_i + \Delta h_{i-1})/(2h)$  — поперечная деформация,  $\Delta h_i$  и  $\Delta h_{i-1}$  — изменение расстояния соответственно между  $i$ -й и  $(i-1)$ -й и между  $i$ -й и  $(i+1)$ -й оболочками в результате деформации,  $h = 0.34 \text{ nm}$  — расстояние между оболочками до деформации, совпадающее с расстоянием между базовыми плоскостями графита,  $p(\varepsilon)$  — внешнее давление, нормальное к базовым плоскостям монокристалла графита и вызывающее в этом монокристалле поперечную деформацию  $\varepsilon$ .

Полная упругая энергия деформированной оболочки рассчитывается как сумма энергии кривизны, энергии деформации, а для оболочки многослойного кластера — также и энергии взаимодействия данной оболочки с другими

$$E = \int_S (w^{\text{curv}} + w^s + w^{\text{int}}) d\sigma. \quad (8)$$

Для нахождения дополнительной упругой энергии, запасенной в результате деформации оболочки, из упругой

энергии оболочки с дефектом следует вычесть ее энергию  $E^0$  до деформации

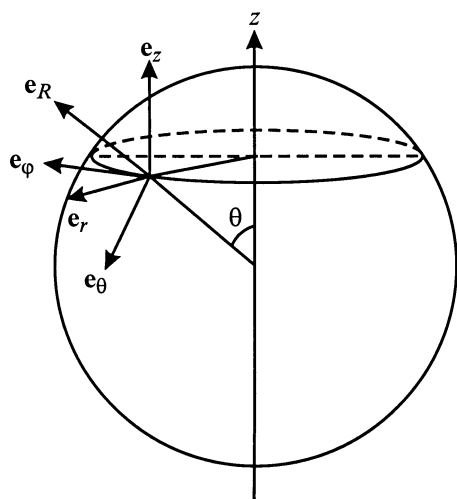
$$E^{\text{extra}} = E - E^0. \quad (9)$$

Упругую энергию деформированной оболочки углеродного кластера вычислим следующим образом. Сначала выразим деформации оболочки и изменения кривизн ее поверхности через перемещения и их производные. Затем, подставляя полученные выражения для продольных деформаций  $\varepsilon_1$ ,  $\varepsilon_2$  и  $\varepsilon_{12}$  в формулу (6), выражение для поперечной деформации  $\varepsilon$  — в формулу (7), а выражения для главных кривизн  $K_1$  и  $K_2$  — в формулу (3), представим с учетом формулы (8) энергию как функционал, зависящий от перемещений и их производных. Равновесному положению деформированной оболочки соответствует минимум этого функционала. Если деформация оболочки вызвана внедрением в нее дефектов, последние можно ввести в оболочку с помощью граничных условий, накладываемых на перемещения.

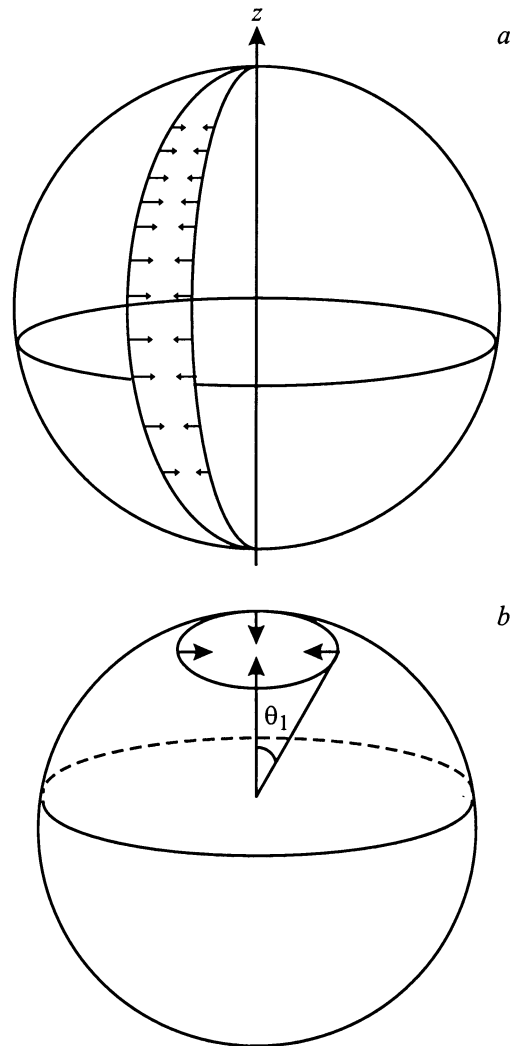
## 2. Упругая энергия дисклинии и центра дилатации в однослойном сферическом углеродном кластере

В качестве примера найдем упругую энергию дисклинии и центра дилатации в однослойном сферическом углеродном кластере. Для этого введем в рассмотрение сферическую и цилиндрическую системы координат с центрами, совпадающими с центром сферы (рис. 2).

В дальнейшем кривые на сфере, заданные уравнением  $\varphi = \text{const}$ , будем называть меридианами, а контуры  $\theta = \text{const}$  — параллельными кругами.



**Рис. 2.** Сферическая и цилиндрическая системы координат, используемые в расчетах энергии дефектов в сферической оболочке. Сферическую систему координат определяет тройка базисных векторов  $(\mathbf{e}_r, \mathbf{e}_\theta, \mathbf{e}_\varphi)$ , цилиндрическую систему координат — тройка базисных векторов  $(\mathbf{e}_r, \mathbf{e}_\varphi, \mathbf{e}_z)$ .



**Рис. 3.** Дисклиния и центр дилатации в сферической оболочке. *a* — способ введения положительной дисклинии: из сферы вырезают сектор, соединяют берега разреза, а затем снимают все приложенные внешние силы; *b* — способ введения центра дилатации. Из сферы вырезают область, ограниченную параллельным кругом  $\theta = \theta_1$ , а затем этот параллельный круг сжимают или растягивают.

Дисклинию в сферу введем следующим образом (рис. 3, *a*). Предположим, что линия дисклинии совпадает с осью сферы. При этом положительную дисклинию мощностью  $\omega > 0$  получим удалением из сферы сектора, ограниченного меридианами  $\varphi = 2\pi - \omega$  и  $\varphi = 2\pi$ , и последующим соединением берегов разреза. Отрицательную дисклинию мощностью  $\omega < 0$  образуем разрезанием сферы по меридиану  $\varphi = 2\pi$ , сжатием сферы вдоль координатной линии  $\varphi$ , приводящим к развороту берегов разреза на угол  $\omega$ , заполнением образовавшейся щели материалом и соединением его с оболочкой. Подобная дисклиния в упругом шаре была исследована в работе [13]. Математически дисклинию в оболочке сферического углеродно-

го кластера зададим с помощью следующих граничных условий:

а) определения дисклинации

$$u_\varphi = \frac{\omega}{2\pi}(R \sin \theta)\varphi; \quad (10)$$

б) условий неразрывности сферы на полюсах

$$u_\theta(\theta = 0) = 0, \quad u_\theta(\theta = \pi) = 0; \quad (11)$$

с) условия закрепления, запрещающего движение сферы как абсолютно твердого тела параллельно своей оси, т.е. задающего перемещение  $u_z$  в одной из точек сферы. Последнее условие задается для удобства расчетов. Поскольку деформация сферической оболочки с дисклинацией симметрична относительно экватора сферы, это условие удобно выбрать в виде  $u_z(z = 0) = 0$  или в сферической системе координат

$$u_\theta(\theta = \pi/2) = 0. \quad (12)$$

При таком выборе условия закрепления сферы перемещения поверхности сферической оболочки с дисклинацией должны в силу симметрии задачи удовлетворять условиям

$$u_\theta(\theta, \varphi) = -u_\theta(\pi - \theta, \varphi), \quad u_R(\theta, \varphi) = u_R(\pi - \theta, \varphi). \quad (13)$$

Рассмотрим теперь способ введения в сферическую оболочку центра дилатации (рис. 3, б). Предположим, что этот дефект расположен на одном из полюсов сферы  $\theta = 0$ . Для внедрения центра дилатации вырежем из сферы сферический сегмент, включающий этот полюс и ограниченный контуром  $\theta = \theta_1$ , где  $\theta_1$  — безразмерный радиус дефекта. Будем считать, что внедрение дефекта в вырезанную область сводится к изменению радиуса параллельного круга  $\theta = \theta_1$ , т.е. к заданию точкам этого параллельного круга постоянных перемещений  $u_r$ .

Для центра дилатации в оболочке сферического углеродного кластера должны выполняться следующие граничные условия:

а) определение центра дилатации  $u_r(\theta = \theta_1) = R\delta \times \sin \theta_1$  или в сферической системе координат

$$u_\theta(\theta = \theta_1) \cos \theta_1 + u_R(\theta = \theta_1) \sin \theta_1 = R\delta \sin \theta_1, \quad (14)$$

где  $\delta$  — мощность дефекта;

б) условие неразрывности поверхности на полюсе  $\theta = \pi$

$$u_\theta(\theta = \pi) = 0; \quad (15)$$

с) условие гладкости деформированной поверхности на этом же полюсе

$$\frac{\partial u_R}{\partial u_\theta}(\theta = \pi) = 0. \quad (16)$$

Выражения деформаций через перемещения в сферической оболочке, содержащей дисклинацию или центр

дилатации, следуют из общих формул [14] и симметрии дефектов, предполагающей отсутствие сдвига

$$\begin{aligned} \varepsilon_\theta &= \frac{1}{R} \left( \frac{\partial u_\theta}{\partial \theta} + u_R \right), \\ \varepsilon_\varphi &= \frac{1}{R} \left( \frac{\omega R}{2\pi} + u_\theta \cot \theta + u_R \right), \\ \varepsilon_{\theta\varphi} &= 0. \end{aligned} \quad (17)$$

Во второй из формул (17) величина  $\omega$  для дисклинации соответствует ее мощности, а для центра дилатации  $\omega = 0$ .

Зависимости изменений главных кривизн от перемещений получим из общих формул [14] для изменения кривизн в направлении меридианов и параллельных кругов и формулы Менье [15]

$$K_n = k \cos \theta. \quad (18)$$

В формуле (18)  $K_n$  — нормальная кривизна поверхности в некотором направлении,  $k$  — кривизна наклонного сечения поверхности в этом же направлении, а  $\theta$  — угол между плоскостями соответствующих сечений. Выражения для изменений главных кривизн имеют вид

$$\begin{aligned} \Delta K_1 &= -\frac{1}{R^2} \left( \frac{\partial^2 u_R}{\partial \theta^2} + u_R \right), \\ \Delta K_2 &= -\frac{1}{R^2} \left( \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2 u_R}{\partial \varphi^2} + \frac{\partial u_R}{\partial \theta} \cos \theta + u_R \sin \theta - u_\theta \cot \theta \right). \end{aligned} \quad (19)$$

Теперь главные кривизны  $K_1$  и  $K_2$  сферической оболочки радиуса  $R$  с дефектом можно выразить через перемещения, подставив (19) в формулы

$$K_1 = 1/R + \Delta K_1, \quad K_2 = 1/R + \Delta K_2. \quad (20)$$

Для нахождения минимума функционала энергии  $E$ , определенного выражением (8), воспользуемся методом Ритца. Для простоты ограничимся случаем деформации сферы, симметричной относительно ее оси. Для дисклинации с линией, проходящей через полюса сферы, представим перемещения  $u_\theta$  и  $u_R$  в виде следующих выражений, удовлетворяющих граничным условиям (10–12):

$$u_\theta = (\pi/2 - \theta) \sum_{k=1}^N a_k \theta^k (\pi - \theta)^k, \quad u_R = \sum_{m=0}^N b_m \theta^m (\pi - \theta)^m. \quad (21)$$

После этого из условий минимума энергии

$$\frac{\partial E^{\text{extra}}}{\partial a_k} = 0 \quad (k = 1 \dots N), \quad \frac{\partial E^{\text{extra}}}{\partial b_m} = 0 \quad (m = 1 \dots N) \quad (22)$$

получим систему  $2N$  линейных уравнений относительно  $a_k$  и  $b_m$ . Решая эту систему, найдем перемещения поверхности оболочки с дисклинацией и ее упругую энергию.

Для центра дилатации, расположенного на полюсе  $\theta = 0$ , представим перемещения  $u_\theta$  и  $u_R$  в виде следующих выражений, удовлетворяющих двум граничным условиям (15), (16) из трех:

$$u_\theta = \sum_{k=1}^N a_k (\pi - \theta)^k, \quad u_R = b_1 + \sum_{m=2}^N b_m (\pi - \theta)^m. \quad (23)$$

Для определения минимума функционала энергии  $E$  при третьем граничном условии (14) введем функцию

$$F = E^{\text{extra}} + \lambda [u_\theta(\theta_1) \cos \theta_1 + u_R(\theta_1) \sin \theta_1 - R\delta \sin \theta_1], \quad (24)$$

минимум которой соответствует условному минимуму  $E^{\text{extra}}$ . Решая после этого систему  $2N + 1$  линейных уравнений

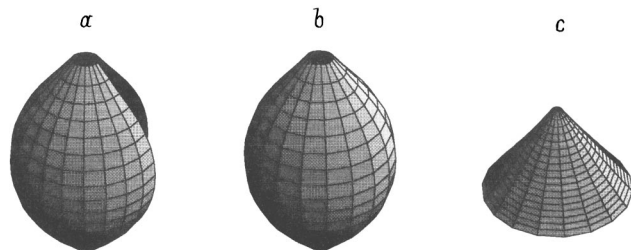
$$\begin{aligned} \frac{\partial F}{\partial \lambda} = 0, \quad \frac{\partial F}{\partial a_k} = 0 \quad (k = 1 \dots N), \\ \frac{\partial F}{\partial b_m} = 0 \quad (m = 1 \dots N) \end{aligned} \quad (25)$$

относительно  $a_k$ ,  $b_m$  и  $\lambda$ , найдем перемещения оболочки с центром дилатации и упругую энергию этого дефекта.

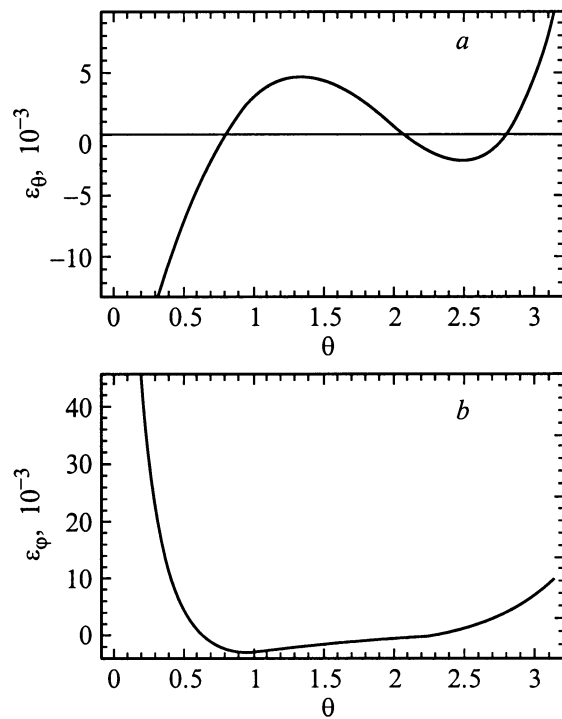
### 3. Результаты и их обсуждение

Численные расчеты, проведенные для сферической оболочки с параметрами  $G = 380$  GPa,  $\nu = 0.3$  и  $R = 2$  nm, дали следующие результаты. Значение упругой энергии дисклинации мощностью  $+\pi/3$  оказалось равно  $-1.50$  eV. Отрицательное значение энергии положительной дисклинации, определенной как изменение энергии кластера относительно энергии исходного сферического кластера, по-видимому, связано с нарушением гладкости поверхности на полюсах сферы.

При введении в оболочку дисклинации (рис. 4, *a, b*) оба шестиугольника, окружавшие полюса сферы, превращаются в пятиугольники. Углы между связями, которые формируют атомы этих пятиугольников, сильно отличаются от углов между связями атомов шестиугольников. В результате поверхность сферы вблизи полюсов перестает быть локально плоской, т. е. гладкой, и превращается



**Рис. 4.** Поверхность сферической оболочки, содержащей дисклинацию мощностью  $+\pi/3$ . *a* — оболочка после удаления сектора, *b* — оболочка после снятия всех приложенных внешних сил, *c* — то же в окрестности одного из полюсов. Указанная окрестность ограничена контуром  $\theta = 0.3$ .



**Рис. 5.** Деформации  $\varepsilon_\theta(\theta)$  (*a*) и  $\varepsilon_\varphi(\theta)$  (*b*), создаваемые центром дилатации в сферической оболочке. Параметры центра дилатации: мощность  $\delta = -0.2$ , безразмерный радиус  $\theta_1 = 0.07$ .

в поверхность, близкую к конической, с отрицательным значением  $K_1$  одной из главных кривизн (рис. 4, *c*). Образование в оболочке областей с отрицательной кривизной, по-видимому, и является причиной уменьшения ее энергии, так как энергия кривизны получившейся оболочки меньше, чем у сферы (см. формулу (3)), в то время как деформации, вызванные внедрением в оболочку дисклинации, малы (а следовательно, мала и соответствующая им энергия деформации). Поскольку введение в сферическую оболочку дисклинации мощностью  $+\pi/3$  приводит к значительным искажениям ее поверхности (рис. 4, *a, b*), используемые для расчета энергии дисклинации формулы оказываются недостаточно точны.

Расчеты перемещений и деформаций (рис. 5) оболочки с центрами дилатации показали, что значительные деформации оболочки могут происходить лишь в малых окрестностях центров этих дефектов, т. е. в их ядрах. Поэтому для центров дилатации расчетные формулы верны. Далее результаты всех расчетов приведены для центров дилатации с безразмерным радиусом  $\theta_1 = b/R$  и безразмерным радиусом ядра  $\theta_c = 2\theta_1$ . Результаты расчетов упругой энергии центров дилатации с различными значениями параметра  $\delta$  приведены в таблице 1. Высокие значения упругой энергии (порядка нескольких eV) связаны с высокими значениями перемещений, задающих дефекты, т. е. с большими выбранными значениями параметра  $\delta$ .

**Таблица 1.** Упругая энергия центра дилатации в сферической оболочке углеродного кластера

Мощность дефекта $\delta$	-0.4	-0.2	0.2	0.4
Упругая энергия $E^{\text{extra}}$ , eV	11.96	3.11	2.68	10.99

Примечание. Параметры центра дилатации:  $\theta_1 = 0.07$ ,  $\theta_c = 0.14$ .

**Таблица 2.** Энергия упругого взаимодействия одинаковых центров дилатации в сферической оболочке углеродного кластера

Мощность дефектов $\delta$	Относительное расстояние между дефектами $\theta_1/\theta_0$	Энергия взаимодействия $E^{\text{int}}$ , eV
-0.2	4	1.73
0.2	4	2.13
-0.2	8	0.99
0.2	8	1.56

Примечание. Параметры центров дилатации:  $\theta_1 = 0.07$ ,  $\theta_c = 0.14$ .

Из приведенных результатов следует, что энергия центров дилатации с противоположными значениями мощности различна, причем большая энергия у центра дилатации, для которого  $\delta < 0$ . Данное обстоятельство связано с различием в кривизнах оболочек, содержащих центр дилатации с положительным или отрицательным значением  $\delta$ . Действительно, введение в сферическую оболочку центра дилатации с мощностью  $\delta < 0$  увеличивает значение ее главных кривизн. Введение центра дилатации с  $\delta > 0$  уменьшает эти кривизны, а следовательно, и дополнительную энергию кривизны  $E_{\text{curv}}^{\text{extra}}$ , которая является их монотонно возрастающей функцией.

Результаты расчетов энергии взаимодействия двух одинаковых центров дилатации в зависимости от их мощности  $\delta$  и углового расстояния  $\theta_0$  между ними представлены в таблице 2. Приведенные в этой таблице результаты свидетельствуют о том, что одинаковые центры дилатации отталкиваются и что энергия их взаимодействия зависит от параметра  $\delta$ .

Таким образом, из полученных результатов следует, что из всех оболочек кластеров заданной площади, которые могут быть деформированы в сферу, минимальной энергией обладает сферическая оболочка. В сферической оболочке центры дилатации с противоположной мощностью (т.е. вакансии и внедренные атомы или их скопления) обладают различной упругой энергией. Энергия дефекта в оболочке кластера зависит от кривизны ее поверхности, причем введение дефекта в оболочку приводит к изменению ее кривизны.

В заключение необходимо отметить, что предложенный в настоящей работе метод расчета энергии деформированных углеродных кластеров применим лишь к кластерам с достаточно большими оболочками (состоящими из  $10^3$  и более атомов), которые можно рассматривать в континуальном приближении.

Авторы выражают признательность М.Ю. Гуткину за чтение рукописи и советы по ее улучшению.

## Список литературы

- [1] C.T. White, J.W. Mintmire, R.C. Mowrey, D.W. Brenner, D.H. Robertson, J.A. Harrison, B.I. Dunlap. In: Buckminsterfullerenes / Ed. by W. Edward Billups, Marco A. Ciufolini. VCH, N. Y. (1993). P. 125.
- [2] T.G. Schmalz, D.J. Klein. In: Buckminsterfullerenes / Ed. by W. Edward Billups, Marco A. Ciufolini. VCH, N. Y. (1993). P. 83.
- [3] G.E. Scuseria. In: Buckminsterfullerenes / Ed. by W. Edward Billups, Marco A. Ciufolini. VCH, N.Y. (1993). P. 103.
- [4] H. Terrans, A.L. Mackay. Prog. Crystal Growth and Charact **34**, 1, 25 (1997).
- [5] V.V. Rotkin, R.A. Suris. The Electrochem. Soc. Proc. **95**, 10, 1263 (1995).
- [6] V.V. Rotkin, R.A. Suris. Proc. of 4<sup>th</sup> Int. Conf. on Advanced Materials, S3-P34. Cancun, Mexico, 27 August-1 September (1995).
- [7] А.Л. Колесникова, А.Е. Романов. ФТТ **40**, 6, 1178 (1998).
- [8] Lewis T. Chadderton, Eugene G. Gamaly. Nucl. Instr. Phys. Res. **B117**, 1-4, 375 (1996).
- [9] A. Krishnan, E. Dujardin, M.M.J. Treacy, J. Hugdahl, S. Lynam, T.W. Ebbesen. Nature **388**, 6641, 451 (1997).
- [10] В.В. Роткин, Р.А. Сурис. ФТТ **41**, 5, 809 (1999).
- [11] Дж. Торп. Начальные главы дифференциальной геометрии. Мир, М. (1982). 360 с.
- [12] В.В. Новожилов. Теория упругости. Судпромгиз, Л. (1958). 366 с.
- [13] I.A. Polonsky, A.E. Romanov, V.G. Gryaznov, A.M. Kaprelov. Phil. Mag. **A64**, 2, 281 (1991).
- [14] В.В. Новожилов. Теория тонких оболочек. Судпромгиз, Л. (1962). 428 с.
- [15] Э.Г. Позняк, Е.В. Шикин. Дифференциальная геометрия. Изд-во МГУ, М. (1990). 384 с.