

03,16,17

Модуль упругости кремниевых и германиевых фуллеренов Si_{60} и Ge_{60}

© Ю.В. Луняков^{1,2}, С.А. Балаган¹

¹ Институт автоматки и процессов управления ДВО РАН, Владивосток, Россия

² Дальневосточный государственный университет, Владивосток, Россия

E-mail: luniakov@iacp.dvo.ru

(Поступила в Редакцию 21 ноября 2014 г.)

С использованием метода функционала плотности были проведены расчеты модулей упругости фуллеренов кремния и германия Si_{60} и Ge_{60} разной симметрии. Показано, что модули упругости метастабильных фуллеренов максимальной симметрии I_h имеют наибольшие величины и в 1.5–1.7 раз превосходят модули упругости соответствующих объемных кристаллических структур. Наиболее стабильные фуллерены имеют симметрию C_1 и меньший модуль упругости. Для фуллеренов кремния Si_{60} он в 1.44 раза, а для фуллеренов германия Ge_{60} в 1.38–1.40 раз больше, чем модули упругости соответствующих кристаллических структур.

Работа была выполнена при финансовой поддержке ведущих научных школ (грант НШ-167.2014.2).

1. Введение

Полупроводниковые технологии на основе кремния и германия, как известно, широко применяются в современной наноэлектронике при производстве и конструировании компьютерных чипов. После изготовления первых интегральных схем в конце 60-х годов прошлого века один из основателей компании Intel Гордон Мур сформулировал закон технологического цикла — так называемый закон Мура [1], который заключается в удвоении количества транзисторов на полупроводниковой микросхеме каждые полтора года. Поскольку, как это ни удивительно, закон Мура продолжает действовать и сегодня, все более актуальной становится проблема поиска новых наноструктур на основе кремния и германия. Такими структурами, например, могли бы быть фуллереноподобные наноструктуры с открытыми оболочками, которые характеризуются достаточно выраженной люминесценцией по сравнению с объемными веществами [2]. Это делает их использование перспективным в области оптоэлектроники.

После открытия икосаэдрической структуры фуллерена C_{60} в 1985 г. [3] системам с открытой оболочкой на основе углерода было посвящено более десятка тысяч работ по данным базы данных Web of Science. Поскольку кремний и германий расположены по соседству с углеродом в периодической таблице Менделеева и тоже имеют 4 валентных электрона, несколько десятков работ посвящено расчетам фуллереноподобных систем на основе кремния. Установлена тенденция к формированию кластеров кремния квазисферической формы [4,5], рассчитаны кремниевые фуллерены [6] и показана возможность существования фуллеренов Ge_{60} , Sn_{60} и Pb_{60} [7]. Что касается экспериментов, то до сих пор нет достаточно достоверных данных о структурах кремния или германия, подобных структуре фуллере-

на C_{60} . Это связывают с тем, что в отличие от C_N нет предпочтительных значений N в распределении кластеров Si_N и Ge_N по N , а количество возможных изомеров с ростом N растет по близкому к экспоненциальному закону. Только в начале этого века экспериментаторы научились синтезировать кремниевые кластеры квазисферической формы, и японские ученые сообщили о том, что им удалось получить устойчивые наноструктуры из 12 и 18 атомов кремния с замкнутой структурой [8]. В связи с этим, большая часть работ по кремниевым и германиевым фуллеренам носит преимущественно теоретический характер и посвящена расчетам их атомных и электронных свойств [9]. Одной из причин отсутствия экспериментальных данных по фуллеренам кремния может являться то, что симметричный фуллерен Si_{60} точечной группы симметрии I_h в отличие от C_{60} является метастабильным, а более низкую энергию имеет фуллерен Si_{60} с симметрией C_{2h} [10,11]. Не будет ничего удивительного, если окажется, что могут существовать более энергетически выгодные структуры фуллеренов Si_{60} или Ge_{60} . В одной из недавних работ [12] было показано, что в системе из N частиц существует порядка $C \sim \exp(\beta \cdot d^*)$ локальных минимумов, где „теоретическая размерность“ системы $d^* = 3N + 3 - k$ (N — количество атомов, k — постоянная ближнего порядка). Для фуллерена Si_{60} один из таких локальных минимумов, по-видимому, и соответствует высокосимметричной структуре усеченного икосаэдра точечной группы симметрии I_h . В расчетах зачастую исследуют именно эту структуру [7,13,14]. Неудивительно, что фундаментальные физические свойства кремниевых и германиевых фуллеренов еще недостаточно изучены даже теоретически в отличие от фуллеренов углеродных. Например, до сих пор ничего неизвестно об упругих свойствах фуллеренов Si_{60} и Ge_{60} , несмотря на то, что модуль упругости фуллерена C_{60} рассчитан достаточно давно

и результаты приведены, например в [15], где показано, что в зависимости от силовых постоянных он принимает значения 826–972 GPa. В недавних расчетах методами Монте-Карло авторы [16] получили значение 746 GPa при низких температурах. Эти расчеты наглядно демонстрируют, что модуль упругости C_{60} более чем в 1.6 раз превосходит модуль упругости алмаза, что согласуется с экспериментальными данными [17].

Возникает вопрос о природе столь большого модуля упругости фуллерена C_{60} : связано ли это с его высокой симметрией геометрии или же со свойствами углерода? Если это связано с симметрией, то значит, для фуллеренов Si_{60} и Ge_{60} такой же симметрии модуль упругости может быть во столько же раз больше по сравнению с модулями упругости объемных кристаллических структур. Данная работа посвящена расчетам модулей упругости германиевых и кремниевых фуллеренов разных точечных групп симметрии, соответствующим различной геометрии. Проведено исследование зависимости модулей упругости от симметрии системы, точности расчета и обменно-корреляционного потенциала.

Модуль упругости по определению является коэффициентом пропорциональности между приложенным давлением внешних сил и относительным изменением объема в случае малых деформаций

$$dV = -B \cdot dP. \quad (1)$$

Внешнее давление P изменяет полную энергию системы dE следующим образом:

$$dE = -P \cdot dV \quad (2)$$

при малых изменениях объема. Если подставить зависимость (2) в определение модуля упругости (1), то при постоянном объеме $V = V_0$ мы получаем

$$B = \left[V \frac{\partial^2 E}{\partial V^2} \right]_{V=V_0}, \quad (3)$$

т.е. коэффициент при квадрате объема в полиномиальном разложении $E(V)$ и будет определять модуль упругости. В работе [18] было проведено специальное исследование зависимости модуля упругости фуллерена от выбора площади поверхности, на которую действует внешнее давление. Эту площадь можно определить как площадь описанной сферы, площадь вписанной сферы или суммарную площадь многогранников, образующих усеченный икосаэдр. В зависимости от выбранного определения мы можем по-разному вычислить объем фуллерена и соответственно получить разные значения модуля упругости. Обычно предполагается, что давление производится силами, действующими по нормали к поверхности фуллерена [15], что представляет собой довольно абстрактный случай. Зачастую объем фуллерена вычисляют через его диаметр, подразумевая, что внешнее давление действует на сферу, описанную вокруг фуллерена [19,20]. Авторами [18] было показано, что замена

правильного икосаэдра описанной (вписанной) сферой дает ошибку в величине объема и, соответственно, модуля упругости более 6%. А разница в модулях упругости, полученных в приближениях описанной и вписанной сферы, будет составлять более 16%. Только в работе [21] при вычислении объема и площади поверхности фуллерена C_{60} было использовано численное интегрирование. Чтобы избежать зависимости результатов от способа вычисления объема и выбора направления приложения внешних сил, мы разработали программу для численного расчета объема фигуры, образованной заданным набором вершин, соответствующим положениям атомов. По положениям атомов определяется набор плоскостей, ограничивающих выпуклый многогранник, соответствующий фуллерену. Затем по методу Монте-Карло определяется объем многогранника $V_p = \frac{M}{N} (V_0 - V_i) + V_i$, где M — количество точек внутри многогранника; N — количество сгенерированных точек; V_0 — объем фигуры, в которую помещен многогранник; V_i — объем сферы, вписанной в многогранник.

2. Методика расчета

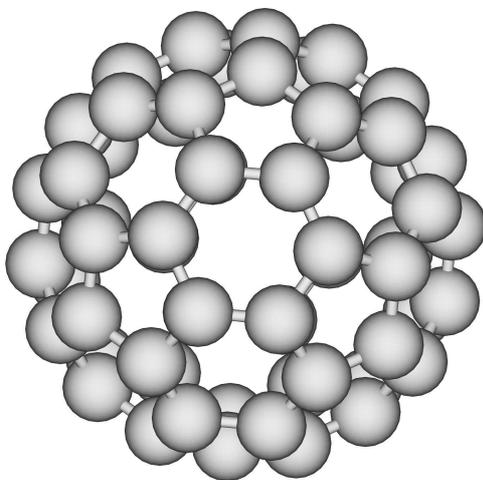
Расчеты полной энергии фуллеренов проводились в рамках теории функционала локальной электронной плотности (ТФП) [22,23] и метода псевдопотенциала в базисе присоединенных плоских волн [24,25], реализованного в программном продукте VASP [26–28]. Обменно-корреляционное взаимодействие учитывалось как в хорошо зарекомендовавшем себя приближении локальной электронной плотности (ПЛП) [29,30], так и в приближении обобщенных градиентов ПОГ [31] в параметризации Пердью–Бурке–Эрнзерхофа [32]. Молекула фуллерена помещалась в прямоугольный ящик размерами 40 Å в каждом измерении, обеспечивая расстояния между соседними молекулами 25–30 Å. Положения атомов оптимизировались до достижения сходимости по силам $\sim 10^{-3}$ eV/Å и по энергиям $\sim 10^{-6}$ eV. Энергия обрезания плоско-волнового базиса составляла $E_{\text{cut}} = 300$ eV для расчетов фуллеренов Si_{60} и Ge_{60} , и $E_{\text{cut}} = 400–600$ eV для тестовых расчетов фуллерена C_{60} . При этом для кремния валентными полагались $3s$ и $3p$ электроны, а для углерода — $2s$ и $2p$ электроны. Расчеты модуля упругости выполнялись, используя определение (3), где использовалась полиномиальное разложение $E(V)$, а объем фуллерена рассчитывался численно с помощью программы „Расчет объема выпуклых многогранников“ [33], реализующей метод Монте-Карло. Сходимость по количеству точек проверялась путем расчета объема при $N = 10^2, 10^3, 10^4, 10^5, 10^6$ и 10^7 . В данной работе использованы значения объема, усредненные по 100 вычислениям при $N = 10^7$. Максимальное стандартное отклонение составило 0.01%.

Таблица 1. Структурные параметры, относительные энергии и модуль упругости фуллеренов кремния Si₆₀ разной симметрии, полученные в ПЛП и ПОГ

Симметрия, потенциал	Длина связей, (Å)	Энергия, (eV)	Модуль упругости, (GPa)	Обменно-корреляционный потенциал
Si ₆₀ (<i>I_h</i>)	2.21; 2.25	4.15	168	ПЛП
	2.24; 2.28	4.33	156	ПОГ
Si ₆₀ (<i>C_{2h}</i>)	2.21–2.29	2.04	147	ПЛП
	2.23–2.31	2.15	133	ПОГ
Si ₆₀ (<i>C₁</i>)	2.27–2.29	0.0	140	ПЛП
	2.29–2.32	0.0	128	ПОГ
Объемный кремний	2.34	–	97	ПЛП
	2.36	–	89	ПОГ

3. Результаты и обсуждение

Тестовые расчеты симметричного фуллерена C₆₀ точечной группы *I_h* были выполнены с использованием геометрии правильного усеченного икосаэдра [34], в котором атомы углерода сгруппированы в вершинах правильных пятиугольников и шестиугольников, как показано на рис. 1. Общей стороной для двух шестиугольников является двойная связь C=C, а общей стороной для одного шести- и одного пятиугольника является одинарная связь C–C. Результаты тестовых расчетов хорошо воспроизводят высокосимметричную структуру фуллерена C₆₀. Длина двойной связи C=C в ПЛП получается равной 1.39 Å, а длина одинарной связи C–C — 1.44 Å, что согласуется с результатами других расчетов [20] и экспериментальными данными [15]. ПОГ дает немного большие значения длин связи — 1.40 Å для C=C и 1.45 Å для C–C. Объем фуллерена C₆₀, рассчитанный численно, в ПЛП получается равным 158.9 Å³, что согласуется с объемом икосаэдрического фуллере-

**Рис. 1.** Атомная структура фуллерена точечной группы симметрии *I_h*.

на 160.5 Å³, приведенным работе [21], с учетом точности расчетов длин связей. ПОГ дает несколько большее значение объема, которое составляет 162.8 Å³.

Что касается модулей упругости, то для углеродного фуллерена C₆₀ он составляет 919 GPa в ПЛП и 882 GPa в ПОГ. Эти значения хорошо согласуются с результатами других расчетов, которые находятся в пределах 810–972 GPa [18,19]. Объемный углерод со структурой алмаза, рассчитанный в схеме *k*-точек 14 × 14 × 14 (560 точек на примитивную ячейку), имеет модуль упругости 465 GPa в ПЛП и 435 GPa в ПОГ. Таким образом, тестовые расчеты фуллерена C₆₀ показывают, что модуль упругости фуллерена примерно в два раза превышает модуль упругости алмаза. Использование разных обменно-корреляционных потенциалов приводит к изменению этого отношения не более чем на 6%.

3.1. Модули упругости кремниевых фуллеренов Si₆₀

Для кремниевого фуллерена Si₆₀ результаты оптимизации геометрии сильно зависят от начальных условий. Результаты расчетов симметричного фуллерена Si₆₀ точечной группы симметрии *I_h*, обозначенного далее для краткости Si₆₀ (*I_h*) с точностью оптимизации по силам $\sim 10^{-2}$ eV/Å показаны в табл. 1. Если в качестве начальной геометрии взять симметричную структуру C₆₀ (рис. 1) с пропорционально увеличенными размерами согласно отношению длин связей в алмазе и кремнии, то в результате оптимизации длина двойной связи Si=Si в ПЛП становится равной 2.21 Å, а длина одинарной связи Si–Si — 2.25 Å. В ПОГ получаются 2.24 Å и 2.28 Å для двойной и одинарной связи соответственно. Это согласуется с результатами других расчетов из первых принципов. Например, расчеты методами Хартри–Фока [7,35] дают для одинарной связи 2.21–2.23 Å, а для двойной связи — 2.27–2.30 Å в зависимости от базиса. Если убрать ограничение по симметрии и увеличить точность оптимизации по силам до 10⁻³ eV/Å, то исходная структура трансформируется в структуру с симметрией *C₁* с

длинами связей в пределах 2.27–2.29 Å в ПЛП или с длинами связей 2.29–2.32 Å в ПОГ, которая показана на рис. 2. Относительные энергии данных систем приведены в табл. 1. Оптимизированный кремниевый фуллерен Si_{60} точечной группы симметрии C_1 , обозначенный далее как $Si_{60}(C_1)$, на 4.15–4.33 eV выгоднее по энергии в сравнении с фуллереном со структурой усеченного икосаэдра симметрии I_h . Согласно результатам [10,11], более стабильной по сравнению с $Si_{60}(I_h)$ является структура фуллерена Si_{60} с симметрией C_{2h} , обозначенная далее как $Si_{60}(C_{2h})$. Мы провели расчеты фуллерена $Si_{60}(C_{2h})$ с длинами связей, приведенными в [10,11], и точностью оптимизации по силам 10^{-2} eV/Å. Его атомная структура показана на рис. 3. В результате оптимизации геометрии длины связей изменились не более чем на 0.05 Å. Как показано в табл. 1, несимметричная структура $Si_{60}(C_1)$ является более чем на 2 eV более выгодной по энергии в сравнении со структурой $Si_{60}(C_{2h})$ и более чем на 4 eV в сравнении со структурой $Si_{60}(I_h)$. Эти данные подтверждают, что симметричная структура, которая оптимальна для фуллеренов C_{60} , не является оптимальной для фуллеренов Si_{60} . Поскольку количество локальных минимумов для структуры кремний из 60 атомов экспоненциально велико, это согласуется с тем, что снятие ограничения по симметрии C_{2h} и увеличение точности оптимизации по силам до 10^{-3} eV/Å приводит к превращению фуллерена $Si_{60}(C_{2h})$ в систему из хаотично расположенных атомов, одна из которых показана на рис. 4. Локальных минимумов из неупорядоченно расположенных атомов может быть получено достаточно много с энергиями в диапазоне от –4.4 до –10.3 eV, что составляет около –0.17 eV/атом. Длины связей, соответствующие этим локальным минимумам, находятся в пределах 2.31–2.46 Å, так что средняя длина связи Si–Si близка к длине связи в объемном кремнии. Это согласуется с известным фактом, что оптимальной структурой кремния является структура типа алмаза, а не фуллерена.

Поскольку нас интересует влияние геометрии кремниевого и германиевого фуллеренов на модуль упругости, мы вычислили модули упругости всех полученных структур с открытыми оболочками и сравнили их с модулями упругости объемного кремния, как показано в табл. 1. Максимальный модуль упругости получается для кремниевых фуллеренов наибольшей симметрии $Si_{60}(I_h)$, которые являются метастабильными и при повышении точности оптимизации по силам до 10^{-3} eV/Å переходят в несимметричную структуру $Si_{60}(C_1)$ с минимальной энергией, взятой за начало отсчета. Модули упругости фуллеренов $Si_{60}(C_1)$ на 28 GPa меньше модулей упругости высокосимметричных фуллеренов $Si_{60}(I_h)$. Как видно из табл. 1, модули упругости метастабильных структур $Si_{60}(C_{2h})$ занимают промежуточные значения и на 4–5% больше модулей упругости наиболее стабильных низкосимметричных фуллеренов $Si_{60}(C_1)$ с минимальной энергией. Таким образом, модуль упругости наиболее выгодных низкосимметричных фуллеренов

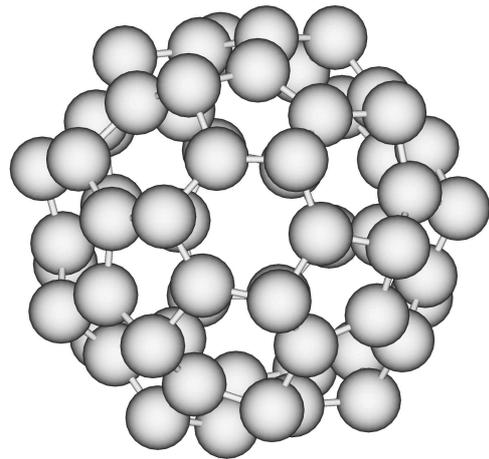


Рис. 2. Атомная структура фуллерена точечной группы симметрии C_1 .

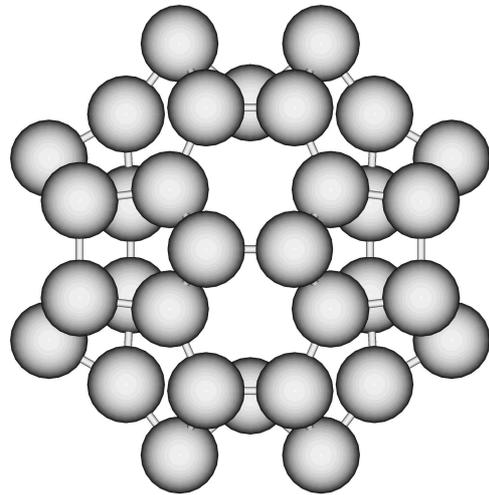


Рис. 3. Атомная структура фуллерена точечной группы симметрии C_{2h} .

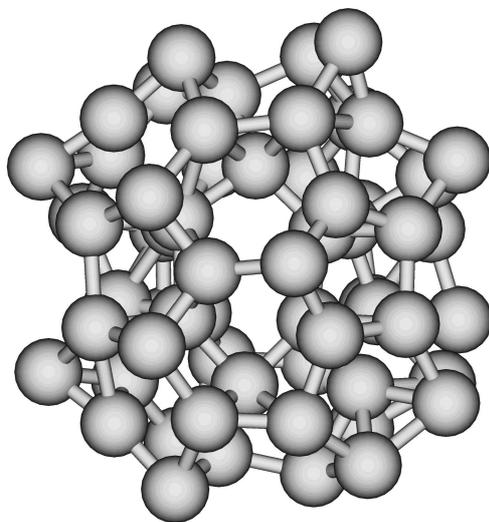


Рис. 4. Неупорядоченная структура фуллерена.

Таблица 2. Структурные параметры, относительные энергии и модуль упругости фуллеренов германия Ge₆₀ разной симметрии, полученные в ПЛП и ПОГ

Симметрия, потенциал	Длина связей, (Å)	Энергия, (eV)	Модуль упругости, (GPa)	Обменно-корреляционный потенциал
Ge ₆₀ (<i>I_h</i>)	2.32; 2.37	9.52	102	ПЛП ПОГ
Ge ₆₀ (<i>C_{2h}</i>)	2.35–2.46 2.41–2.52	2.49 2.52	97 82	ПЛП ПОГ
Ge ₆₀ (<i>C₁</i>)	2.37–2.42 2.39–2.43	00 0.0	97 80	ПЛП ПОГ
Объемный германий	3.82	–	69 58	ПЛП ПОГ

кремния на 44% превышает модуль упругости объемного кристалла, тогда как у симметричных фуллеренов — на 73 и 75% в ПЛП и ПОГ соответственно. Мы видим, что так же как и углеродные фуллерены, кремневые наноструктуры с открытыми оболочками имеют гораздо большие модули упругости, чем твердотельные системы.

3.2. Модули упругости германиевых фуллеренов Ge₆₀

Расчеты полной энергии германиевых фуллеренов Ge₆₀ свидетельствуют о более высокой стабильности низкосимметричных структур, как и в случае с кремневыми фуллеренами Si₆₀. Как показано в табл. 2, наименее стабильным является симметричный фуллерен точечной группы симметрии *I_h*, обозначенный далее Ge₆₀ (*I_h*). Длины связей Ge–Ge и Ge=Ge в этом фуллерене равны 2.32 и 2.37 Å соответственно что согласуется с результатами других расчетов [7]. Расчеты германиевых фуллеренов без ограничений по симметрии с точностью оптимизации по силам 10⁻³ eV/Å дают более энергетически выгодную несимметричную структуру, обозначенную как Ge₆₀ (*C₁*). Из табл. 2 видно, что энергия фуллерена Ge₆₀ (*C₁*) более чем на 9.5 eV меньше энергии фуллерена Ge₆₀ (*I_h*), что составляет почти 0.16 eV/атом. Расчеты фуллеренов германия симметрии *C_{2h}*, обозначенных как Ge₆₀ (*C_{2h}*), с длинами связей примерно на 4% больше соответствующих длин связей в фуллерене Si₆₀ (*C_{2h}*), были выполнены с точностью оптимизации по силам 10⁻² eV/Å. Как показано в табл. 2, энергии фуллеренов Ge₆₀ (*C_{2h}*) примерно на 2.5 eV больше энергии несимметричных фуллеренов Ge₆₀ (*C₁*). Оптимизация фуллеренов Ge₆₀ (*C_{2h}*) с увеличением точности до 10⁻³ eV/Å приводит к образованию структуры из хаотично расположенных атомов, аналогичных показанной на рис. 4. Энергия таких структур получается в диапазоне от –6.2 до –8.5 eV и соответствует локальным минимумам с межатомными расстояниями Ge–Ge 2.46–2.59 Å, близкими к межатомным расстояниям в объемном германии.

С модулями упругости германиевых фуллеренов ситуация аналогична кремневым фуллеренам: наиболее симметричные германиевые фуллерены имеют максимальный модуль упругости, а несимметричные — минимальный модуль упругости, соответственно. В ПЛП-модуль упругости фуллерена Ge₆₀ (*I_h*) получается равным 102 GPa, а модуль упругости фуллерена с симметрией Ge₆₀ (*C_{2h}*) и Ge₆₀ (*C₁*) — 97 GPa. В ПОГ удалось получить только более стабильные структуры низкой симметрии Ge₆₀ (*C_{2h}*) и Ge₆₀ (*C₁*), которые показаны в табл. 2. Как и для кремневых фуллеренов, ПОГ дает меньшие значения модулей упругости, чем ПЛП, за исключением фуллерена Ge₆₀ (*C_{2h}*), для которого они одинаковы в пределах точности вычислений. Таким образом, результат расчета германиевых фуллеренов подтверждает, что модуль упругости симметричных фуллеренов почти в 1.5 раза превышает модуль упругости кристаллического германия. Что касается несимметричных фуллеренов, то даже для них модули упругости почти на 40% больше, чем модули упругости объемных структур.

4. Заключение

Расчеты модулей упругости фуллеренов Si₆₀ и Ge₆₀ из первых принципов показывают, что модули упругостей имеют максимальные величины для метастабильных фуллеренов точечной группы симметрии *I_h* и превышают модули упругостей объемных кристаллических структур более чем в 1.7 раз для кремния и в 1.5 раз для германия. Наиболее стабильные несимметричные фуллерены точечной группы симметрии *C₁* характеризуются меньшими модулями упругости, которые тем не менее примерно в 1.4 раза превышают соответствующие значения для объемных структур. Метастабильные фуллерены группы симметрии *C_{2h}* имеют промежуточные значения модулей упругости, которые на 40–50% больше, чем модули упругости несимметричных фуллеренов. Таким образом, модули упругостей кремневых Si₆₀ и германиевых Ge₆₀ фуллеренов с открытыми оболочками, так же

как и в случае фуллеренов C_{60} , существенно больше, чем модули упругости соответствующих кристаллических структур.

Список литературы

- [1] G.E. Moore. *Electronics* **38**, 114 (1965).
- [2] L.T. Canham. *Appl. Phys. Lett.* **57**, 1046 (1990).
- [3] H.W. Kroto, J.R. Heath, S.C. O'Brien. *Nature* **318**, 162 (1985).
- [4] M.F. Jarrold, V.A. Constant. *Phys. Rev. Lett.* **67**, 2994 (1991).
- [5] K.D. Rinnen, M.L. Mandich. *Phys. Rev. Lett.* **69**, 1823 (1992).
- [6] V. Kumar. *Nanosilicon* / Ed. by V. Kumar. Elsevier Ltd. (2008). 368 p.
- [7] J. Leszczynski, I. Yanov. *J. Phys. Chem. A* **103**, 396 (1999).
- [8] H. Huiira, T. Miyazaki, T. Kanayama. *Phys. Rev. Lett.* **86**, 1733 (2001).
- [9] А.А. Ищенко, Г.В. Фетисов, Л.А. Асланов. *Нанокремний: свойства, получение, применение, методы исследования и контроля*. М., Физматлит, (2011). 648 с.
- [10] B. Li, P. Cao, D. Que. *Phys. Rev. B* **61**, 1685 (2000).
- [11] B. Li, P. Cao, B. Song, Zh. Ye. *J. Mol. Structure: Theochem* **620**, 189 (2003).
- [12] M. Valle, A.R. Oganov. *Acta Cryst. A* **66**, 507 (2010).
- [13] E.F. Sheka, E.A. Nikitina, V.A. Zayets, I. Ya. Ginzburg. *Int. J. Quantum Chem.* **88**, 441 (2002).
- [14] В.В. Филиппов, А.Н. Власов. *Журнал радиэлектрон. (электрон. журн.)*. *11* (2011)
<http://jre.cplire.ru/jre/nov11/15/text.html>.
- [15] R.S. Ruoff, A.L. Ruoff. *Appl. Phys. Lett.* **59**, 1553 (1991).
- [16] M.G. Ahangaria, A. Fereidoon, M.D. Ganji, N. Sharifi. *Physica B* **423**, 1 (2013).
- [17] M.S. Amer, J.F. Maguire. *Chem. Phys. Lett.* **476**, 232 (2009).
- [18] O.O. Kovalev, V.A. Kuzkin. *Nanosystems: Physics, Chemistry, Mathematic* **2**, 65 (2011).
- [19] J. Cai, R.F. Bie, X.M. Tanc, C. Luc. *Physica B* **344**, 99 (2004).
- [20] M. Ghorbanzadeh Ahangari, A. Fereidoon, M. Darvish Ganji, N. Sharifi. *Physica B* **423**, 1 (2013).
- [21] G.B. Adams, M.O. Keeffe, R.S. Ruoff. *J. Phys. Chem.* **98**, 9465 (1994).
- [22] H. Hohenberg, W. Kohn. *Phys. Rev. B* **136**, 864 (1964).
- [23] W. Kohn, J.L. Sham. *Phys. Rev. A* **140**, 1133 (1965).
- [24] P.E. Blöchl. *Projector augmented-wave method*. *Phys. Rev. B* **50**, 17953 (1994).
- [25] G. Kresse, D. Joubert. *Phys. Rev. B* **59**, 1758 (1999).
- [26] G. Kresse, J. Hafner. *Phys. Rev. B* **47**, 558 (1993).
- [27] G. Kresse, J. Hafner. *Phys. Rev. B* **49**, 14251 (1994).
- [28] G. Kresse, J. Furthmüller. *Phys. Rev. B* **54**, 11169 (1996).
- [29] D.M. Ceperley, B.J. Alder. *Phys. Rev. Lett.* **45**, 566 (1980).
- [30] J.P. Perdew, A. Zunger. *Phys. Rev. B* **23**, 5048 (1981).
- [31] J.P. Perdew, Y. Wang. *Phys. Rev. B* **33**, 8800 (1986).
- [32] J.P. Perdew, K. Burke, M. Ernzerhof. *Phys. Rev. Lett.* **77**, 3865 (1996).
- [33] Св-во о гос. регистрации № 2014660324.
- [34] Martin Feyereisen, in <http://www.ccl.net/chemistry/resources/data/fullerenes/index.shtml>
- [35] R. Crespo, M.C. Piqueras, F. Tom. *Synthetic Met.* **77**, 13 (1996).