

Особенности трансформации Стоуна–Уэльса в фуллеренах C_{20} и C_{36}

© А.И. Подливаев, К.П. Катин, Д.А. Лобанов, Л.А. Опенов

Национальный исследовательский ядерный университет „МИФИ“,
Москва, Россия

E-mail: AIPodlivayev@mephi.ru

(Поступила в Редакцию 16 марта 2010 г.)

Методом *ab initio* и в рамках моделей сильной связи исследована начальная стадия процесса образования дефектов в фуллеренах C_{20} и C_{36} . Сравнение с трансформацией Стоуна–Уэльса в фуллерене C_{60} выявило наличие у последней двух независимых этапов, первый из которых представляет собой „неполную“ трансформацию Стоуна–Уэльса. На этом этапе фуллерены C_{20} и C_{36} переходят в метастабильные дефектные конфигурации с двумя смежными „окнами“ на их „поверхности“, тогда как аналогичная конфигурация для фуллерена C_{60} является неустойчивой и отвечает седловой стационарной точке потенциальной энергии кластера. Для фуллерита $(C_{36})_n$ предсказан новый механизм пластической деформации, обусловленный трансформацией Стоуна–Уэльса.

Работа выполнена в рамках реализации проекта ФЦП „Научные и научно-педагогические кадры инновационной России“ на 2009–2013 годы (Государственный контракт № П416).

1. Введение

С момента открытия в 1985 г. фуллерена C_{60} [1] (рис. 1, *a*) и до настоящего времени сферообразные кластеры углерода находятся в центре внимания большого количества научных групп, ведущих их экспериментальные и теоретические исследования. Сейчас известно уже несколько десятков различных фуллеренов, в том числе C_{70} , C_{36} и т.д. В 2000 г. был обнаружен наименьший из возможных фуллеренов — кластер C_{20} [2] (рис. 1, *b*), в котором связи C–C образуют только пятиугольники, а шестиугольники (в отличие от фуллеренов большего размера) отсутствуют.

В исследованиях фуллеренов важное место занимает изучение дефектов этих структур. Последовательность термоактивированных переходов между дефектными изомерами представляет интерес с точки зрения как устойчивости фуллерена к тепловому распаду, так и обратного процесса — многоступенчатого отжига дефектов, в результате которого и происходит, возможно, формирование собственно фуллерена из исходного сильно разупорядоченного кластера (см., например, обзор [3]).

Начальной стадией распада фуллерена является переход в близкий по структуре (и энергии) дефектный изомер, что стимулирует появление новых дефектов и в конечном итоге приводит к полной потере фуллереном сфероидальной формы и/или к его фрагментации при нагревании. В фуллерене C_{60} первый дефектный изомер образуется обычно за счет трансформации Стоуна–Уэльса (SW) [4], которая заключается в перестановке двух связей C–C (далее „изомер SW“ или „дефект SW“). Трансформацию SW можно также представить себе как поворот одной связи C–C на угол 90° (рис. 2). При этом число пяти- и шестиугольников на „поверхности“ кластера не изменяется. Другая картина

имеет место в фуллерене C_{20} , где трансформация SW приводит к образованию двух четырехугольников и двух шестиугольников, отсутствующих в исходном кластере (рис. 3). В некоторых фуллеренах наблюдается и другой дефектный изомер с двумя смежными „окнами“, периметр которых составляет 8 и более атомов (далее „дефект 2O“, рис. 3). Для фуллерена C_{20} метастабильный дефект этого типа был обнаружен в работе [5].

Подчеркнем, что как дефекты SW, так и дефекты 2O представляют собой метастабильные атомные структуры, т.е. конфигурации, отвечающие локальным минимумам потенциальной энергии кластера E_{pot} как функции координат $\{r_i\}$ составляющих его атомов. Эти минимумы отделены от исходной бездефектной конфигурации энергетическими барьерами, высоты U которых, согласно формуле Аррениуса, определяют вероятности образования того или иного дефекта при нагревании. Выполненное нами методом молекулярной динамики моделирование временной эволюции нагретых до высокой

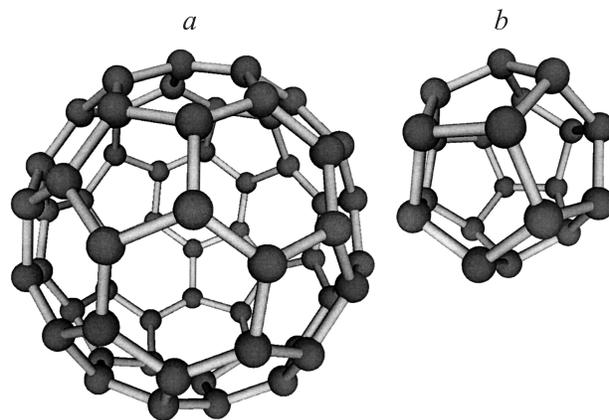


Рис. 1. Фуллерены C_{60} (*a*) и C_{20} (*b*).

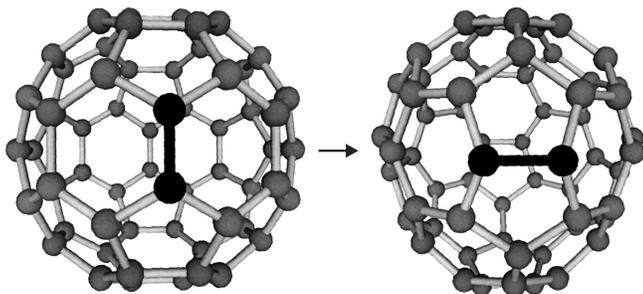


Рис. 2. Трансформация SW в фуллере C_{60} . Черным выделена связь C—C, которая при трансформации поворачивается на угол 90° .

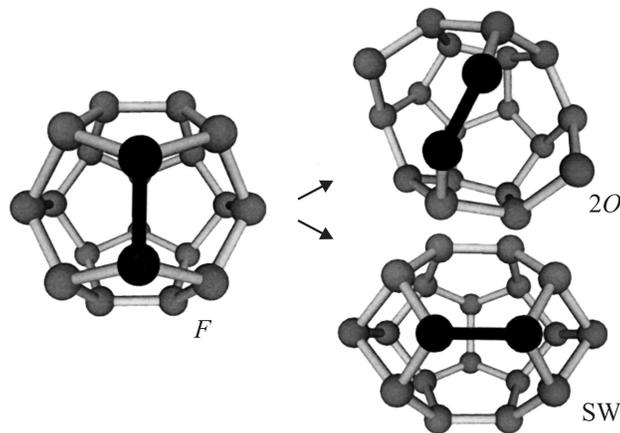


Рис. 3. Дефекты 2O и SW в фуллере C_{20} . Черным выделена связь C—C, которая при трансформации SW поворачивается на угол 90° , а при неполной трансформации SW — на угол около 45° . F — идеальный (бездефектный) фуллерен.

температуры фуллеренов C_{60} и C_{20} [5,6] показало, что в фуллере C_{60} преобладают дефекты SW, а дефекты 2O вообще не наблюдаются. Напротив, в фуллере C_{20} образуются как дефекты SW, так и дефекты 2O (относительная частота их появления чувствительна к выбору потенциала межатомного взаимодействия). Это, в частности, указывает на различие соответствующих величин U в фуллеренах C_{20} и C_{60} и, более того, на различную топологию гиперповерхностей $E_{\text{pot}}(\{\mathbf{r}_i\})$ в этих кластерах. По-видимому, тип основных дефектов во многом определяется размером фуллерена (т.е. числом атомов n в нем). Поэтому представляет интерес изучить каналы образования дефектов в фуллеренах с $20 < n < 60$, что и сделано в настоящей работе на примере фуллерена C_{36} . Нашей основной целью было детальное теоретическое исследование механизмов перехода фуллеренов C_{20} и C_{36} в дефектные изомеры, сравнение путей этих переходов с трансформацией SW в фуллере C_{60} , а также выявление сходства и различия каналов образования дефектов в фуллеренах C_n с разными n .

2. Метод расчета

Определение метастабильных и седловых конфигураций, отвечающих стационарным точкам $E_{\text{pot}}(\{\mathbf{r}_i\})$ кластеров C_{60} , C_{20} и C_{36} , проводилось как *ab initio* методом Хартри—Фока (HF) с базисом 6-31G*, так и в рамках ортогональной [7] и неортогональной [8] моделей сильной связи (ОТВ и НТВ соответственно). Под стационарными точками здесь подразумеваются такие конфигурации в пространстве размерности $(3N-6)$ координат N атомов, в которых действующие на атомы силы равны нулю (при этом метастабильные конфигурации соответствуют локальным минимумам E_{pot} , а седловые — локальному максимуму по одной координате и минимумам по всем остальным, т.е. седловые конфигурации являются неустойчивыми). Интересующее нас число степеней свободы кластера равно $3N-6$, поскольку мы полагаем, что на кластер не действуют внешние силы, а поэтому смещение кластера как единого целого и его вращение не изменяют потенциальной энергии системы. Знание величины E_{pot} ближайших к идеальному фуллерену седловых точек позволяет найти высоты U соответствующих энергетических барьеров и оценить таким образом энергии активации распада фуллерена по различным каналам, а следовательно, и предсказать основной канал распада.

Использование различных потенциалов межатомного взаимодействия требовалось нам для повышения степени достоверности результатов. Хотя методы *ab initio* и являются более строгими, они могут приводить к существенным ошибкам при расчете величины E_{pot} в седловых точках и, следовательно, при определении высот барьеров, тогда как модели сильной связи часто обеспечивают лучшее соответствие энергии активации ее экспериментальному значению (см., например. [9]). Кроме того, методы сильной связи [7,8] гораздо менее требовательны к компьютерным ресурсам и позволяют моделировать временную эволюцию нагретого кластера в течение макроскопического (по атомным меркам) времени $\sim 1 \mu\text{s}$ и при этом определить, какие именно дефекты и как часто появляются в данном кластере. Некоторые атомные конфигурации, для которых в настоящей работе приведены результаты расчета статических характеристик, были исходно обнаружены именно при моделировании динамики того или иного фуллерена [5,6]. Для поиска стационарных точек на гиперповерхности потенциальной энергии кластера и определения характера изменения E_{pot} вдоль координаты реакции, соединяющей различные изомеры кластера, мы использовали методику, описанную в работе [10].

3. Неполная трансформация Стоуна—Уэльса

Несмотря на существенное различие атомных конфигураций дефектов SW и 2O (рис. 3), оба они образуются из идеального фуллерена одинаковым образом,

а именно путем поворота одной из пар ближайших атомов (т.е. связи C–C) вокруг их центра масс, причем в процессе такого поворота эти атомы не смещаются в перпендикулярном „поверхности“ фуллерена направлении. Но если при образовании дефекта SW пара атомов поворачивается на угол 90° (рис. 2 для C_{60} и рис. 3 для C_{20}), то при образовании дефекта $2O$ — на угол около 45° , т.е. примерно вдвое меньший (рис. 3). Принимая это во внимание, можно рассматривать дефект $2O$ как результат неполной трансформации Стоуна–Уэльса, которая приводит к образованию метастабильной конфигурации, промежуточной между идеальным фуллереном и дефектом SW. В дальнейшем наряду с обозначениями SW и $2O$ для метастабильных дефектных изомеров будем использовать обозначения F для идеальных (без дефектов) фуллеренов и S_{F-SW} , S_{F-2O} , S_{2O-SW} и т.п. — для конфигураций, которые отвечают седлам первого порядка, разделяющим соответствующие метастабильные конфигурации на зависимости E_{pot} от координаты реакции.

4. Результаты

Далее представлены результаты исследования путей перехода фуллеренов C_{20} , C_{36} и C_{60} в различные дефектные изомеры и встречающихся на этих путях неустойчивых и метастабильных атомных конфигураций.

4.1. Фуллерен C_{60} . Чтобы понять особенности механизмов образования дефектов в фуллеренах C_{20} и C_{36} , мы начали с анализа данных о стационарных точках

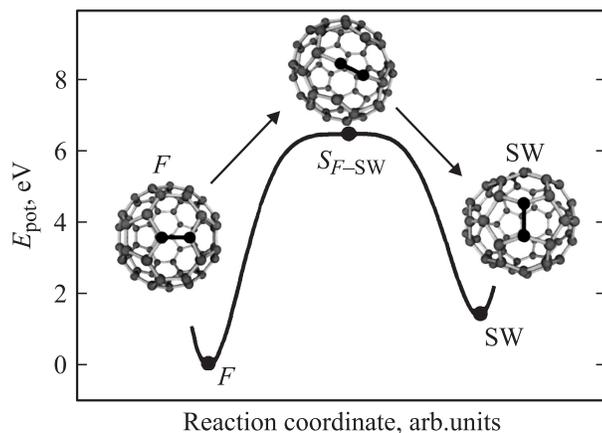


Рис. 4. Потенциальная энергия E_{pot} кластера C_{60} как функция координаты реакции при трансформации SW. F — идеальный (бездефектный) фуллерен, SW — дефектный метастабильный фуллерен, результат трансформации SW, S_{F-SW} — седловая точка для дефектного фуллерена с двумя смежными „окнами“ (седло первого порядка). Черным выделена связь C–C, которая при трансформации SW поворачивается на угол 90° . Величина E_{pot} определена методом ОТВ (при использовании методов HF и NTB пути переходов качественно не изменяются, хотя количественные отличия имеют место, см. таблицу). За начало отсчета принята энергия конфигурации F .

Потенциальная энергия E_{pot} (в eV) дефектных метастабильных и седловых конфигурациях кластеров C_{20} , C_{36} и C_{60} , близких к соответствующим конфигурациям идеальных фуллеренов

Кластер	Конфигурация	HF	ОТВ	NTB
C_{20}	$2O$	4.00	3.83	3.02
	SW	0.26	3.23	2.27
	$3O$	4.89	4.44	2.82
	S_{F-2O}	4.40	3.94	3.29
	S_{2O-SW}	4.35	5.00	3.86
	S_{2O-3O}	5.20	4.78	3.43
C_{36}	$2O$	5.37	5.40	—
	SW	−0.83	−0.33	−0.14
	S_{F-2O}	5.73	5.41	—
	S_{2O-SW}	5.72	5.41	—
	S_{F-SW}	—	5.43	4.52
C_{60}	SW	2.01	1.42	1.33
	S_{F-SW}	8.58	6.48	5.23

Примечание. F — бездефектные конфигурации, SW, $2O$ и $3O$ — метастабильные конфигурации с дефектами SW, $2O$ и $3O$ соответственно. За начало отсчета приняты энергии соответствующих конфигураций F . Приведены результаты расчета методом HF с базисом 6-31G* и в рамках моделей сильной связи ОТВ и NTB. Прочерки означают отсутствие стационарной точки для данного метода расчета.

кластера C_{60} вблизи конфигурации идеального фуллерена с симметрией I_h (конфигурация F на рис. 4). Образующийся в результате трансформации SW метастабильный изомер SW имеет симметрию C_{2v} и содержит две пары пятиугольников с общими сторонами. Исследование деталей этой трансформации показало, что существуют два различных пути перехода $F \rightarrow SW$. Высоты энергетических барьеров U для них примерно одинаковы и составляют от 5.2 до 8.6 eV каждый в зависимости от метода расчета (см. таблицу), что согласуется с результатами работ [11–13], полученными методом ОТВ и в рамках теории функционала плотности (здесь необходимо отметить, что методы из первых принципов часто завышают величину U на 1–2 eV [9]).

На рис. 4 изображена зависимость E_{pot} от координаты реакции для одного из этих путей ($F-S_{F-SW}-SW$), наиболее часто реализующегося при моделировании динамики фуллерена C_{60} [6]. В соответствии с результатами работ [11–13] седловая точка S_{F-SW} отвечает одновременному симметричному (concerted) смещению атомов в поворачивающейся связи C–C. Этой седловой точке соответствует конфигурация с двумя смежными „окнами“ (рис. 4). Второй путь перехода $F-SW$ в настоящей работе не рассматривается, поскольку, во-первых, он реализуется крайне редко [6], а во-вторых, при движении по этому пути не образуется интересующая нас конфигурация с двумя смежными „окнами“ (для него седловая точка расположена вблизи мелкого минимума $E_{pot}(\{r_i\})$ [13–15], которому отвечает конфигурация с несимметрично смещенными атомами пово-

рачивающейся связи C—C; один из них приподнимается над „поверхностью“ фуллера, а второй — нет).

То, что конфигурация S_{F-SW} с двумя „окнами“ является стационарной точкой безотносительно к выбору потенциала взаимодействия, достаточно очевидно из ее симметричного вида (рис. 4). Она очень похожа на дефектную конфигурацию $2O$ в фуллере C_{20} (рис. 3 и 4), но в отличие от последней отвечает не локальному минимуму, а локальному максимуму E_{pot} на пути $F-SW$, т.е. является седловой. Поэтому эта конфигурация неустойчива. Таким образом, в фуллере C_{60} метастабильный дефектный изомер $2O$ отсутствует, и трансформация SW может быть только полной.

4.2. Фуллерен C_{20} . Как следует из данных молекулярной динамики [5], термический распад фуллера C_{20} в отличие от фуллера C_{60} всегда начинается с перехода в метастабильный изомер $2O$ за счет неполной трансформации SW . Затем дефектообразование может происходить по двум каналам: либо завершается трансформация SW , либо формируется новая метастабильная конфигурация $3O$ с тремя смежными „окнами“ (рис. 5). Она получается из конфигурации $2O$ при разрыве еще одной связи C—C, что и приводит к появлению третьего „окна“. После этого распад кластера, как правило, становится необратимым [5].

Расчет зависимости E_{pot} от соответствующей координаты реакции на путях $F-2O-SW$ и $F-2O-3O$ (рис. 5) показал, что в фуллере C_{20} конфигурация $2O$, во-первых, действительно является метастабильной, а во-

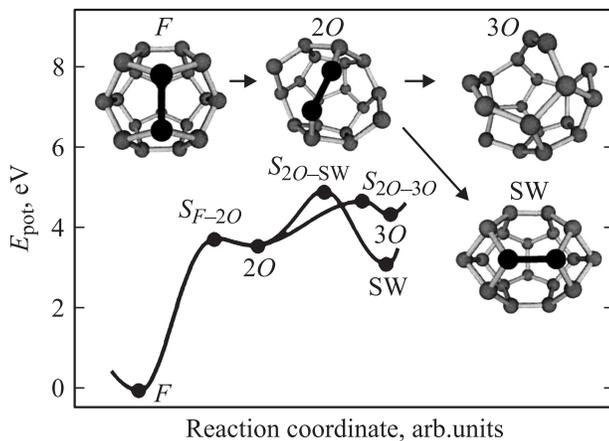


Рис. 5. Потенциальная энергия E_{pot} кластера C_{20} как функция координаты реакции при полной и неполной трансформации SW . $2O$ — метастабильная конфигурация с двумя смежными „окнами“, соответствующая неполной трансформации SW , $3O$ — метастабильная конфигурация с тремя смежными „окнами“ (следующий за неполной трансформацией SW этап распада фуллера C_{20}); S_{F-2O} , S_{2O-SW} и S_{2O-3O} — соответствующие седла первого порядка. Остальные обозначения те же, что на рис. 4. Величина E_{pot} определена методом ОТВ (при использовании методов HF и NTV пути переходов качественно не изменяются, хотя количественные отличия имеют место, см. таблицу). За начало отсчета принята энергия конфигурации F .

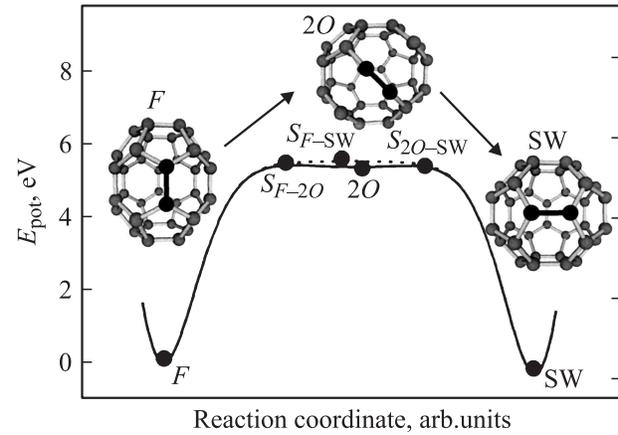


Рис. 6. Потенциальная энергия E_{pot} кластера C_{36} как функция координаты реакции. Сплошная линия — для перехода $F-2O-SW$, пунктирная линия — для перехода $F-SW$. Величина E_{pot} определена методом ОТВ. При использовании методов HF и NTV картина изменяется качественно (см. таблицу и текст). За начало отсчета принята энергия конфигурации F .

вторых, она представляет собой своеобразную „развилку“, после которой происходит либо переход $2O \rightarrow SW$, либо $2O \rightarrow 3O$. Потенциальные энергии соответствующих метастабильных и седловых конфигураций представлены в таблице. Обращает на себя внимание тот факт, что относительные энергии некоторых метастабильных и седловых конфигураций существенно зависят от метода расчета. Это, в частности, приводит к тому, что высота барьера для перехода $2O \rightarrow 3O$ может быть как меньше, так и больше высоты барьера для перехода $2O \rightarrow SW$. Соответственно и преобладающие пути распада конфигурации $2O$ будут различными. Как бы то ни было, наши результаты (совместно с данными работы [5]) свидетельствуют о наличии в кластере C_{20} метастабильной конфигурации $2O$, формирующейся в результате неполной трансформации SW и отсутствующей (а точнее, являющейся неустойчивой) в кластере C_{60} . Это открывает новый путь дефектообразования, альтернативный обычной трансформации SW .

4.3. Фуллерен C_{36} . Для фуллера C_{36} с симметрией D_{6h} мы исследовали переходы в конфигурацию $2O$ с двумя смежными „окнами“ и в конфигурацию с симметрией D_{2d} , которая получается при такой трансформации SW , когда имеет место поворот одной из расположенных на „экваторе“ связей C—C (рис. 6). Энергии соответствующих конфигураций приведены в таблице. Заметим, что энергия изомера SW меньше энергии исходного фуллера, что согласуется с результатами расчетов методом функционала плотности [16].

Из анализа таблицы следует, что если для фуллеренов C_{60} и C_{20} все три использованных в настоящей работе численных метода дают качественно одинаковую картину переходов между изомерами этих кластеров (рис. 4 и 5), хотя количественные различия и имеются, то для фуллера C_{36} это не так. В первую очередь

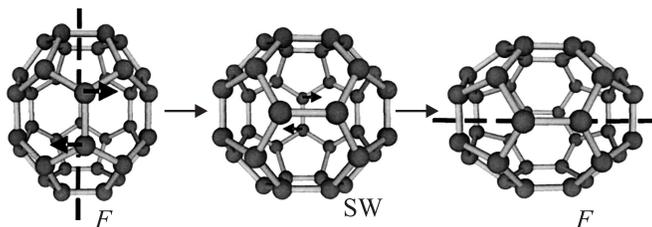


Рис. 7. Двойная трансформация SW в фуллерене C_{36} , приводящая к изменению его ориентации. Штриховыми линиями обозначены исходная и конечная оси симметрии фуллерена.

обращает на себя внимание отсутствие метастабильного изомера $2O$ (а следовательно, и седловых точек для переходов $F \rightarrow 2O$ и $2O \rightarrow SW$) при расчете методом NTB, т.е. полная трансформация SW происходит без промежуточных метастабильных состояний, как и в фуллерене C_{60} . Напротив, методы HF и ОТВ дают переход $F \rightarrow 2O \rightarrow SW$ через дефект $2O$ — как для одного из путей в фуллерене C_{20} , т.е. имеет место неполная трансформация SW. Более того, при расчете методом ОТВ мы обнаружили два разных пути трансформации SW (рис. 6), один из которых такой же, как в фуллерене C_{60} ($F \rightarrow SW$, конфигурация с двумя „окнами“ — седловая), а другой — как в фуллерене C_{20} ($F \rightarrow 2O \rightarrow SW$, конфигурация с двумя „окнами“ — метастабильная).

Заметим, что в методе ОТВ дефект $2O$ хоть и наблюдается, но соответствует не ярко выраженному локальному минимуму $E_{\text{пот}}$, как в методе HF, а плато на зависимости $E_{\text{пот}}$ от координаты реакции (рис. 6): разность энергий конфигураций $2O$ и S_{F-2O} составляет всего лишь ~ 0.01 eV. Для путей переходов $F \rightarrow SW$ и $F \rightarrow 2O \rightarrow SW$ величины $E_{\text{пот}}$ конфигураций $2O$ и S_{F-SW} тоже различаются очень мало (на 0.03 eV), что также свидетельствует о плато потенциальной энергии в окрестности конфигурации с двумя „окнами“. В методе HF прямой переход $F \rightarrow SW$ отсутствует. Столь сильная чувствительность результатов к методу вычислений указывает на то, что для окончательного решения вопроса о существовании в фуллерене C_{36} локального минимума $E_{\text{пот}}$, отвечающего метастабильному изомеру $2O$, требуется использование более точных методов расчета. В любом случае можно утверждать, что если этот минимум и существует, то он очень мелкий, а если нет, то гиперповерхность потенциальной энергии в окрестности конфигурации с двумя „окнами“ является почти плоской. Поэтому такая конфигурация оказывается сравнительно долгоживущей при нагреве фуллерена C_{36} до высоких температур, что мы и наблюдали при моделировании динамики этого кластера.

Заметим, что изображенная на рис. 6 трансформация SW не является единственно возможной, поскольку в фуллерене C_{36} существует четыре различных типа связей C–C, каждая из которых может быть повернута на угол 90° . Однако после поворота других связей

на „поверхности“ фуллерена C_{36} возникают четырехугольники — энергетически невыгодные напряженные конфигурации, аналогичные дефекту SW в кластере C_{20} (рис. 3).

Отметим интересную особенность трансформации SW, присущую исключительно фуллерену C_{36} с симметрией D_{6h} . Две последовательные трансформации SW с участием пар атомов, расположенных на „экваторе“ фуллерена (рис. 7), дают цепочку переходов $F-SW-F$, начинающуюся и завершающуюся идеальными фуллеренами, но с перпендикулярными друг другу осями симметрии, вдоль которых „вытянуты“ исходный и конечный фуллерены. Такие переходы мы наблюдали при моделировании эволюции нагретого фуллерена C_{36} методом молекулярной динамики.

5. Заключение

Укажем на два возможных направления практического применения полной и неполной трансформации SW. Сохранение в фуллерите из фуллеренов C_{36} с D_{6h} симметрией [17] двойной трансформации SW может привести к новому механизму пластичности этого фуллерита. Если обычно пластичность твердого тела обусловлена движением дефектов (как правило, дислокаций), то в фуллерите C_{36} сами размеры составляющих его фуллеренов C_{36} под действием внешнего механического напряжения могут изменяться в двух взаимно перпендикулярных направлениях. Этот новый механизм пластичности отличается от дислокационного прежде всего отсутствием в кристалле концентраторов напряжений (дислокаций или скоплений других дефектов), в результате чего подавляется образование зародышей трещин. Кроме того, действие данного механизма ограничено полной ориентацией фуллеренов вдоль оси действия напряжения (в отличие от неограниченной генерации дислокаций источником Франка–Рида). Такой механизм пластичности позволяет снять локальные напряжения, что снижает хрупкость образца.

Сравнительно долгоживущие конфигурации со смежными „окнами“ в фуллеренах C_{20} и C_{36} при неполной трансформации SW представляют интерес не только с фундаментальной точки зрения (как метастабильные изомеры, отсутствующие в фуллерен C_{60}), но и с практической. Например, эффект открытия и закрытия на „поверхности“ этих фуллеренов „окон“, достаточных по размеру для проникновения в фуллерен молекулы водорода, можно попытаться использовать для создания вентиля, высвобождающего молекулярный водород из запасающей его углеродной наноструктуры (фуллерена или нанотрубки, закрытой „шапкой“ из половинки фуллерена).

Неполная трансформация SW присуща не только фуллеренам C_{20} и C_{36} . Дефект $2O$ наблюдался нами также при моделировании динамики фуллерена C_{28} . Можно ожидать возникновения таких дефектов и в

других малых фуллеренах. Что касается фуллеренов C_n с $n > 60$, то, с нашей точки зрения, основной путь дефектообразования в них должен быть таким же, как и в фуллерене C_{60} . Тем не менее было бы весьма интересно проверить это путем непосредственных расчетов.

Список литературы

- [1] H.W. Kroto, J.P. Heath, S.C. O'Brien, R.F. Curl, R.E. Smalley. *Nature* **318**, 162 (1985).
- [2] H. Prinzbach, A. Weller, P. Landenberger, F. Wahl, J. Worth, L.T. Scott, M. Gelmont, D. Olevano, B. von Issendorff. *Nature* **407**, 60 (2000).
- [3] Ю.Е. Лозовик, А.М. Попов. *УФН* **167**, 751 (1997).
- [4] A.J. Stone, D.J. Wales. *Chem. Phys. Lett.* **128**, 501 (1986).
- [5] И.В. Давыдов, А.И. Подливаев, Л.А. Опенов. *ФТТ* **47**, 751 (2005).
- [6] Л.А. Опенов, А.И. Подливаев. *Письма в ЖЭТФ* **84**, 73 (2006).
- [7] C.H. Xu, C.Z. Wang, C.T. Chan, K.M. Ho. *J. Phys.: Cond. Matter* **4**, 6047 (1992).
- [8] M.M. Maslov, A.I. Podlivaev, L.A. Openov. *Phys. Lett. A* **373**, 1653 (2009).
- [9] М.М. Маслов, Д.А. Лобанов, А.И. Подливаев, Л.А. Опенов. *ФТТ* **51**, 609 (2009).
- [10] V.F. Elesin, A.I. Podlivaev, L.A. Openov. *Phys. Low-Dim. Struct.* **11**, 91 (2000).
- [11] Y. Kumeda, D.J. Wales. *Chem. Phys. Lett.* **374**, 125 (2003).
- [12] H.F. Bettinger, B.I. Yakobson, G.E. Scuseria. *J. Am. Chem. Soc.* **125**, 5572 (2003).
- [13] А.И. Подливаев, Л.А. Опенов. *Письма в ЖЭТФ* **81**, 656 (2005).
- [14] R.L. Murry, D.L. Strout, G.K. Odom, G.E. Scuseria. *Nature* **366**, 665 (1993).
- [15] R.L. Murry, D.L. Strout, G.E. Scuseria. *Int. J. Mass Spectrom. Ion Proc.* **138**, 113 (1994).
- [16] Y. Jin, C. Hao. *J. Phys. Chem. A* **109**, 2875 (2005).
- [17] C. Piskoti, J. Yanger, A. Zettl. *Nature* **393**, 771 (1998).