

12,16,17

Цепочки карбин-карбинофуллеренов C-C₂₀

© Л.А. Опенов¹, А.И. Подливаев^{1,2,¶}

¹ Национальный исследовательский ядерный университет „МИФИ“, Москва, Россия

² Научно-исследовательский институт проблем развития научно-образовательного потенциала молодежи, Москва, Россия

¶ E-mail: AIPodlivayev@mephi.ru

Поступила в Редакцию 23 июля 2019 г.

В окончательной редакции 23 июля 2019 г.

Принята к публикации 24 июля 2019 г.

Представлены результаты компьютерного моделирования новой одномерной углеродной структуры — цепочек, состоящих из карбинофуллеренов C₂₀, соединенных атомами углерода. Определены энергии связи. Методом молекулярной динамики изучена их термическая устойчивость. Исследована также устойчивость цепочек к растяжению и проведено сравнение с устойчивостью цепочек карбинофуллеренов C₂₀ без промежуточных атомов углерода. Показано, что предпочтительным каналом термического распада является слияние соседних карбинофуллеренов, а деформационного — отрыв крайнего карбинофуллерена от цепочки. Определены предельные деформации цепочек, а также температурные зависимости их времени жизни до момента распада. Найдены значения энергий активации и частотных факторов процесса распада в законе Аррениуса.

Ключевые слова: карбинофуллерен, цепочка, устойчивость, молекулярная динамика.

DOI: 10.21883/FTT.2019.12.48588.556

1. Введение

После открытия графена [1], нанотрубок [2] и фуллеренов [3] интерес к синтетическим углеродным структурам низкой размерности неуклонно возрастает, что связано с уникальными механическими и электронными характеристиками подобных веществ. Комбинации малых углеродных кластеров, которые как „кирпичики“ формируют структуры различной размерности, позволяют создавать широкий класс синтетических материалов, обладающих самыми различными электронными и механическими свойствами. Так фуллерены C₆₀, объединенные силами Ван-дер-Ваальса, образуют трехмерное вещество — фуллерит [4,5]. Другим примером синтетической структуры являются пиподы [6,7] — одномерные цепочки фуллеренов, помещенных в углеродную нанотрубку. Нанотрубка является оболочкой — силовым каркасом, обеспечивающим прочность всей структуры.

Если от синтетического вещества требуются термическая устойчивость и механическая прочность, более перспективными представляются структуры, сформированные из углеродных кластеров малого размера. Часто в малых кластерах существуют заметные напряжения, обусловленные неоптимальными углами межатомных связей, и кластеры, фактически, являются радикалами. При образовании конгломерата из таких элементов, напряжения частично снимаются, а между кластерами возникают сравнительно сильные ковалентные связи.

Так, согласно теоретическим расчетам, ковалентная связь возникает между двумя фуллеренами C₂₀ [8] и в

цепочке из таких фуллеренов [9], а экспериментально в газовой фазе обнаружены заряженные комплексы (C₂₀)_k⁺ с k = 2–13 [10]. Также образует одномерную [11], двумерную [12] и трехмерную [13] структуры углеродный кластер C₈, имеющий форму куба.

Карбинофуллерены (каркасные углеродные структуры, в которых значительная часть атомов имеет двух соседей и находится в состоянии sp-гибридизации см., например, [14]) привлекательны в качестве элементов синтетических структур по двум причинам. Во-первых, связи в цепочках sp-гибридизованных атомов достаточно прочные, и, во-вторых, эти структуры обладают способностью к высокой обратимой деформации. Интересующий нас в этой работе карбинофуллерен C₂₀, представленный на рис. 1, в полной мере обладает этими качествами. Карбинофуллерен C₂₀, образован тремя цепочками, каждая из которых включает шесть sp-гибридизованных атомов. Эти цепочки шиты двумя sp²-гибридизованными атомами, представляющими собой „полуса“ данной структуры. Термическая устойчивость отдельного карбинофуллерена C₂₀ исследована в работе [15]. В этой работе было показано, что энергия активации его распада достаточно высока и составляет 2.6 eV. Карбинофуллерены C₂₀ могут образовывать цепочки, соединяясь друг с другом через полюсные атомы. На рис. 2, a представлен димер C₂₀-C₂₀ — короткий фрагмент такой цепочки, состоящий из двух карбинофуллеренов C₂₀. Устойчивость к растяжению одномерной структуры, состоящей из карбинофуллеренов C₂₀, исследована в работе [16]. В этой работе было

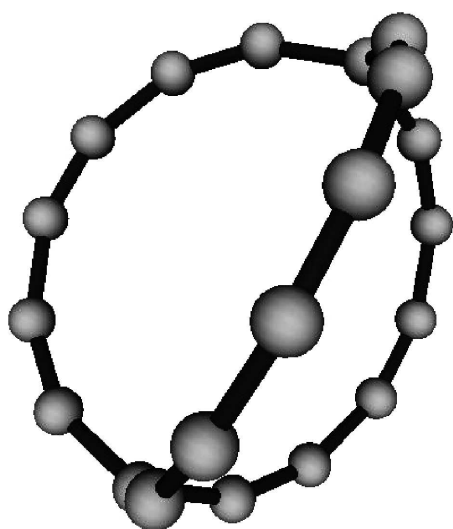


Рис. 1. Карбинофуллерен C_{20} .

показано, что димер $(C_{20})_2$ (см. рис. 2, *a*), тример $(C_{20})_3$, тетрамер $(C_{20})_4$ к крайним атомам которых приложена разрывающая сила, разрываются при относительном удлинении $\delta = 21-23\%$. Аномальная устойчивость к растяжению цепочки из таких кластеров объясняется тем, что деформация приводит в основном не к увеличению длин внутриваляльных связей, а к изменению углов между ними вследствие распрямления карбиновых цепочек вдоль оси структуры.

Также в работе [16] исследовалась температурная устойчивость димера, тримера и тетрамера, и было показано, что каналы температурного распада всех изучаемых структур совпадают с характером их разрыва при растяжении. Во всех случаях разрывается самая слабая связь — связь между соседними карбинофуллеренами. Увеличить прочность этого слабого звена можно было бы поместив между соседними карбинофуллеренами карбиновую цепочку. В настоящей работе сделана попытка усилить связь одномерной структуры, внедрив между соседними карбинофуллеренами минимально возможный фрагмент карбиновой цепочки — один атом углерода (см. рис. 2, *b*). Промежуточный атом углерода будет иметь sp -гибридизацию, а соединен-

ные с ним полюсные атомы карбинофуллеренов будут sp^3 -гибридизованы. Для отличия названия цепочек карбинофуллеренов $C_{20}-C_{20}-C_{20}-\dots$ от новой одномерной структуры $C_{20}-C-C_{20}-C-C_{20}-C-\dots$ обозначим последнюю как цепочку карбин-карбинофуллеренов.

Представленная работа направлена на определение равновесной структуры фрагментов этих цепочек разной длины. Также изучается их устойчивость к воздействию температуры и растяжения. При исследовании будут выбраны граничные условия, которые наименее благоприятны для устойчивости изучаемых структур, поскольку в настоящей работе мы проводим нижнюю оценку границы устойчивости. Будут изучены цепочки, состоящие из двух, трех и четырех фрагментов $(C-C_{20})$. Подобные структуры могут найти применения в нанoeлектронных устройствах.

2. Методы расчета

В данной работе численно решались задачи, которые разделяются на две группы: статическую и динамическую. В группе статических задач изучаются равновесные характеристики карбин-карбинофуллереновых цепочек различной длины и устойчивость их к растяжению. В группе динамических задач определяется термическая устойчивость данных структур. Рассматривались три типа цепочек: $C_{20}-C-C_{20}$ (димер, см. рис. 2, *b*), $C_{20}-C-C_{20}-C-C_{20}$ (тример) и $C_{20}-C-C_{20}-C-C_{20}-C-C_{20}$ (тетрамер).

При статическом и динамическом моделировании применялись свободные граничные условия, поскольку периодические исключают возможность некоторых каналов термического распада, связанных с наличием крайних карбинофуллеренов (например, замыкания цепочки в кольцо или касание ближайших карбинофуллеренов с последующим образованием ковалентных связей), а в данной работе нас интересует нижняя оценка устойчивости структуры. Алгоритм исследования термической устойчивости цепочек карбин-карбинофуллеренов и устойчивости к растяжению аналогичен тому, который применялся в работе [16] для моделирования цепочек карбинофуллеренов.

Динамическое моделирование цепочек проводилось в рамках микроканонического NVE ансамбля [17], в кото-

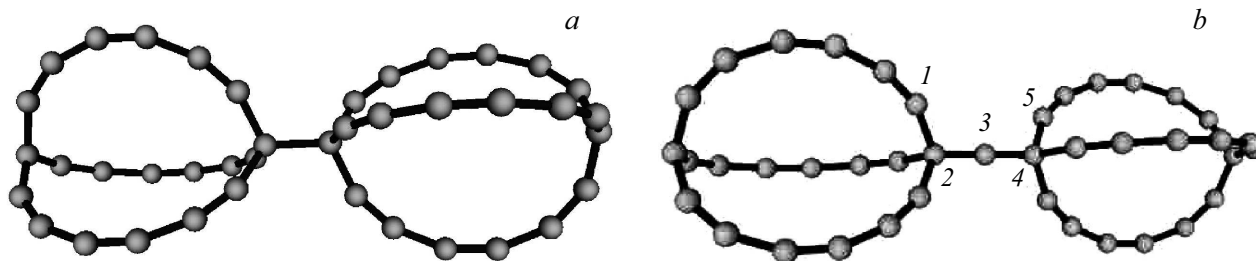


Рис. 2. Димеры. Карбинофуллерен (*a*) и карбин-карбинофуллерен (*b*). 3 — промежуточный атом. 2, 4 — полюсные атомы. 1, 5 — ближайшие соседи полюсных атомов.

Параметры цепочек карбин-карбинофуллеренов и карбинофуллеренов C₂₀

Цепочка	Длина связи $d, \text{ \AA}$	Энергия связи $E_b/n, \text{ eV/at}$	Энергия активации $E_a, \text{ eV}$	Частотный фактор $A, 10^{12} \text{ 1/s}$	Параметры разрыва $F_{break}, \text{ eV/\AA} (\delta, \%)$
Димер (C ₂₀) ₂ [16]	1.641	-6.680	0.148 ± 0.015	11.0 ± 2.8	4.4 (23.5)
Димер C(C ₂₀) ₂	1.437	-6.608	0.287 ± 0.019	11.4 ± 2.1	6.1 (25.8)
Тример (C ₂₀) ₃ [16]	1.650	-6.688	0.480 ± 0.055	99.3 ± 24.5	4.8 (22.1)
Тример C ₂ (C ₂₀) ₃	~ 1.436 ~ 1.483	-6.5909	0.284 ± 0.037	44.8 ± 12.0	5.8 (41.4)
Тетрамер (C ₂₀) ₄ [16]	1.650	-6.693	0.470 ± 0.070	96.6 ± 26.5	4.8 (20.9)
Тетрамер C ₃ (C ₂₀) ₄	1.435 ~ 1.519	-6.582	0.308 ± 0.063	100.4 ± 31.0	5.6 (30.3)

ром полная энергия E сохраняется в процессе эволюции системы. В качестве исходной выбиралась равновесная атомная конфигурация с минимальной потенциальной энергией, определенная в разделе статического моделирования. Начальное распределение скоростей атомов подчинялось распределению Максвелла с различными температурами. Роль температуры в микроканоническом ансамбле играет мера кинетической энергии, называемая микроканонической температурой T_m , определяемая по формуле [18,19]

$$\langle E_{kin} \rangle = \frac{1}{2} k_B T_m (3n - 6),$$

где $\langle E_{kin} \rangle$ — усредненная по времени кинетическая энергия системы, n — число атомов в ней, k_B — постоянная Больцмана. Полагается, что значения полного импульса и момента импульса системы равны нулю. Этот подход известен как „теория ограниченного теплового резервуара“ (finite heat bath theory) [20,21]. В рамках этой теории среднее время жизни τ изолированной системы определяется следующим приближенным аналогом формулы Аррениуса с поправкой Клотца (Klots) первого порядка [20,21]:

$$\tau^{-1}(T_m) \approx \exp(-E_0/(k_B T^*)), \quad (1)$$

где A — частотный фактор, E_a — энергия активации, $T^* = T_m - E_a/2C$, $C = (3n - 6)k_B$ — микроканоническая теплоемкость.

Межатомные взаимодействия описывались в рамках неортогональной модели сильной связи [22], уступающей по точности методам *ab initio*, но требующей значительно меньших компьютерных ресурсов. Компьютерная эффективность этой модели позволяет проводить длительные молекулярно-динамические расчеты, необходимые для исследования термической устойчивости рассматриваемых систем. В то же время она

демонстрирует отличное согласование с более строгими методиками, основанными на теории функционала плотности, для исследованных ранее одномерных систем, содержащих атомы углерода в состояниях с различными типами гибридизации [23,24]. Кроме того, она успешно применялась для исследования термической и механической устойчивости кластеров C₂₀ и других углеродных систем [25–30].

Моделирование термического распада при сравнительно высоких температурах позволяет определить параметры A и E_a в формуле (1), после чего аррениусовская экстраполяция позволяет предсказать время жизни системы при низких температурах, для которых непосредственное моделирование распада невозможно из-за больших затрат компьютерного времени.

Для анализа термодинамической устойчивости цепочек при $T = 0$ в работе определяется энергия связи атомов в n — атомном кластере как $E_b(n) = E(n) - n \times E(1)$, где $E(n)$ — энергия цепочки, содержащей n атомов углерода, $E(1)$ — энергия одного атома углерода. Отрицательная величина E_b говорит об устойчивости цепочки (кластера) относительно ее деления на n изолированных атомов.

3. Результаты и их обсуждение

3.1. Равновесная структура и энергетические характеристики цепочек карбин-карбинофуллеренов

В данном разделе определены равновесные конфигурации цепочек карбин-карбинофуллеренов различной длины. Их динамическая устойчивость подтверждена рассчитанным фоновым спектром этих структур (в спектрах отсутствуют мнимые частоты). Основные характеристики внесены в сводную таблицу совместно с данными цепочек карбинофуллеренов [16].

3.1.1. Димер C_{20} -C-C $_{20}$. На рис. 2, *b* представлена равновесная структура димера C_{20} -C- C_{20} . Также, как и в случае димера C_{20} - C_{20} [16] минимальную энергию имеет конфигурация, в которой карбинофуллерены повернуты относительно друг друга на угол $\varphi = 60^\circ$ вокруг оси, проходящей через межкластерную связь. Однако, по сравнению с димером карбинофуллерена C_{20} - C_{20} энергия димера C_{20} -C- C_{20} очень слабо зависит от вращения карбинофуллеренов C_{20} относительно друг друга. Так энергия димера C_{20} -C- C_{20} при повороте вокруг оси на угол $\varphi = 60^\circ$ возрастает на 0.12 eV, в то время как для димера C_{20} - C_{20} эта величина равна 0.0008 eV. Это соотношение ожидаемо, поскольку карбинофуллерены C_{20} в димере C_{20} -C- C_{20} отделены друг от друга атомом углерода. Удельная энергия связи этого димера $E_b/n = -6.608$ eV/at выше аналогичной величины для димера C_{20} - C_{20} , которая равна -6.680 eV/at [16] (см. таблицу). То, что энергия димера C_{20} -C- C_{20} выше энергии димера C_{20} - C_{20} не означает, что он менее устойчив к воздействию температуры и механических деформаций. В работе [16] показано, что основным каналом температурного распада и механического разрушения при растяжении является разрыв связи между карбинофуллеренами. Длина этой связи (обозначаемая далее d) в C_{20} - C_{20} равна 1.641 Å [16], а в димере C_{20} -C- C_{20} длины связи карбинофуллеренов C_{20} с атомом углерода одинаковы и равны 1.437 Å, что косвенно свидетельствует о большей устойчивости димера C_{20} -C- C_{20} к распаду по каналу фрагментации, связанным с отделением какого-либо карбинофуллерена от соседнего с ним промежуточного атома углерода.

3.1.2. Тример C_{20} -C-C $_{20}$ -C-C $_{20}$. На рис. 3 представлена равновесная структура тримера C_{20} -C- C_{20} -C- C_{20} . На этом рисунке видно два типа соединения соседних карбинофуллеренов C_{20} через промежуточные атомы углерода. Связи, подходящие к левому промежуточному атому углерода параллельны друг другу и равны 1.437 и 1.435 Å (в таблице дано среднее значение), и соединяют карбинофуллерены, повернутые друг относительно друга вокруг оси на угол $\varphi = 60^\circ$. Связи, подходящие к правому промежуточному атому углерода не параллельны друг другу (угол между ними 120°), а их величины равны 1.482 и 1.485 Å. Соединяют эти связи карбинофуллерены, которые не повернуты относительно друг друга (угол $\varphi = 0^\circ$).

3.1.3. Тетрамер C_{20} -C-C $_{20}$ -C-C $_{20}$ -C-C $_{20}$. На рис. 4 представлена равновесная конфигурация тетрамера. Особенности структуры тетрамера аналогичны особенностям тримера C_{20} -C- C_{20} -C- C_{20} . Три левых карбинофуллерена C_{20} разделены двумя атомами углерода, и все шесть связей, относящихся к этим атомам параллельны друг другу. Длины этих связей (слева направо) равны 1.437, 1.435, 1.435, 1.435 Å соответственно. Три левых карбинофуллерена C_{20} повернуты относительно друг друга на угол $\varphi = 60^\circ$ вокруг оси, проходящей через межкластерную связь. Последняя пара связей, соединяющих

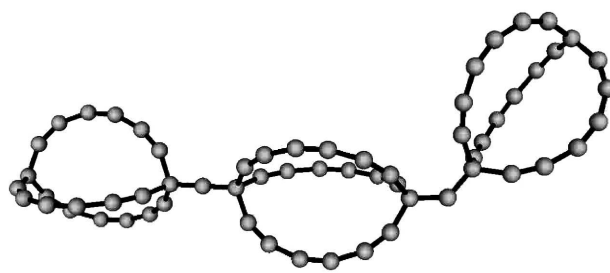


Рис. 3. Тример C_{20} -C- C_{20} -C- C_{20} .

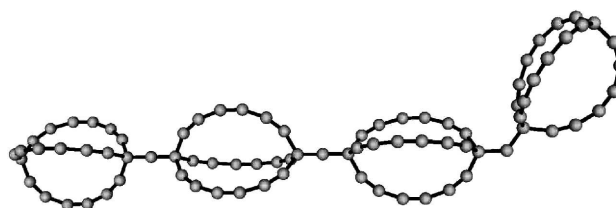


Рис. 4. Тетрамер C_{20} -C- C_{20} -C- C_{20} -C- C_{20} .

3-й и 4-й карбинофуллерены C_{20} не параллельны друг другу (угол между ними $\sim 120^\circ$ как в тримере), а сами карбинофуллерены не повернуты относительно друг друга (угол $\varphi = 0^\circ$).

Из данных таблицы видно, что удельная потенциальная энергия цепочек незначительно возрастает с ростом длины цепочки, что, видимо, связано с увеличением доли *sp*-гибризованных атомов за счет промежуточных атомов.

3.2. Устойчивость цепочек к растяжению

Определение предела устойчивости цепочки к растяжению мы проводили аналогично алгоритму, приведенному в работе [16]. Мы прикладывали разрывающую ее силу к крайним полюсным атомам. Величина этой силы увеличивалась последовательно с шагом 0.1 eV/Å. После каждого такого увеличения проводилась релаксация координат всех атомов цепочки. Максимальное значение силы, при которой цепочка еще не разрывается, обозначим F_{break} . Относительное удлинение цепочки δ (в процентах) при этой силе определялось следующим образом:

$$\delta = 100(L_{break} - L_0)/L_0,$$

где L_{break} и L_0 — расстояния между крайними полюсными атомами цепочки при разрывающей силе F_{break} и в отсутствие силы, соответственно.

При разрыве димера он разделяется на карбинофуллерен C_{20} и кластер C- C_{20} . При разрыве тримера и тетрамера от каждого из них отделяется один крайний карбинофуллерен. Из данных таблицы видно, что цепочки карбин-карбинофуллеренов более устойчивы к растяжению, чем цепочки карбинофуллеренов. Для их

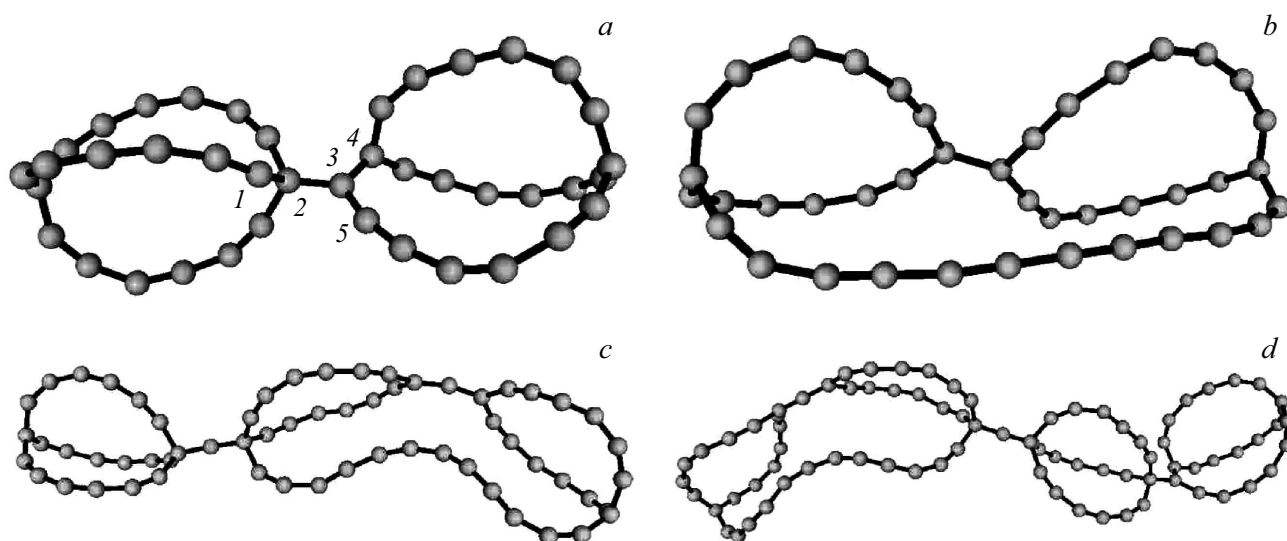


Рис. 5. Распад цепочек карбин-карбинофуллеренов C-C₂₀. Распад димера: первая фаза (а) и вторая фаза (b). Распад тримера (с) и тетрамера (d).

разрыва требуется сила на 20–40% больше в зависимости от длины цепочки. Предельная деформация у них также выше. Аномальные значения предельного удлинения для тримера и тетрамера обусловлено не только растяжением карбинофуллеренов C₂₀, но и тем обстоятельством, что исходно эти цепочки изогнуты (смотри рис. 3 и 4), и при растяжении распрямляются. Исследование формы растянутых цепочек показало, что в процессе деформации сначала происходит распрямление цепочек тримера и тетрамера, и только после этого начинается деформация карбинофуллеренов C₂₀.

3.3. Термическая устойчивость цепочек

Моделирование динамики димера, тримера и тетрамера проводилось при температурах $T_m = 600–2500$, $550–1500$ и $600–1100$ К соответственно. Каналы механического разрыва и термического распада цепочек карбин-карбинофуллеренов и существенно отличаются друг от друга. Основным каналом распада является слияние двух соседних карбинофуллеренов. Похожая форма потери устойчивости при термическом распаде наблюдается у цепочек классических фуллеренов C₂₀ [31], однако слияние карбинофуллеренов имеет свои особенности — этот процесс многостадийный. Первая стадия термического дефектообразования одна и та же для цепочек разной длины и для любой температуры. Пример возникающего первоначально дефекта представлен на рис. 5,а. Этот дефект возникает при разрыве связи между атомами 4 (полюсной атом) и 5, взамен которой возникает связь между промежуточным атомом 3 и атомом 5 (нумерацию смотри на рис. 2, b и 5, а). Реакция образования этого дефекта — экзотермическая. Потенциальная энергия данной дефектной configura-

ции после градиентной релаксации координат атомов на 3.5 eV ниже энергии исходного димера.

Следующие стадии распада не одинаковы в цепочках разной длины и для разных температур. Примеры вариации каналов последующей стадии распада представлены на рис. 5, b–d для димера, тримера и тетрамера, соответственно. В результате коагуляции соседних карбинофуллеренов C₂₀ образуются конфигурации, напоминающие „очки“ (рис. 5, b и c). Несмотря на внешнюю схожесть, форма этих дефектов различна. На рис. 5, b кольца в „очках“ образованы 14 и 15 атомами, а на рис. 5, c оба кольца содержат 14 атомов. Также на рис. 5, c между кольцами имеется промежуточный атом, в отличие рис. 5, b. Эта стадия распада цепочки также является экзотермической. После релаксации, потенциальная энергия дефектного димера (рис. 5, b) понижается на 7 eV по сравнению с энергией исходного димера (рис. 2, b). Конфигурация тетрамера, представленная на рис. 5, d включает два дефекта. Левый дефект тетрамера аналогичен дефекту, представленному на рис. 5, c, а правый — представленному на рис. 5, a. Вследствие экзотермичности процессов дефектообразования температура кластера повышается, и окончательный распад цепочки происходит за время, много меньшее времени образования первого дефекта.

На рис. 6 представлена зависимость логарифма времени жизни τ цепочки от величины $1/T^*$ (смотри выражение (1)). Также на этом рисунке представлены интерполяционные прямые, параметры которых получены методом наименьших квадратов, и которые позволяют определить величины соответствующих энергий активации E_a и частотных факторов A . Полученные данные внесены в таблицу. Используя для оценки времени жизни τ формулу (1), найдем, что при комнатной темпе-

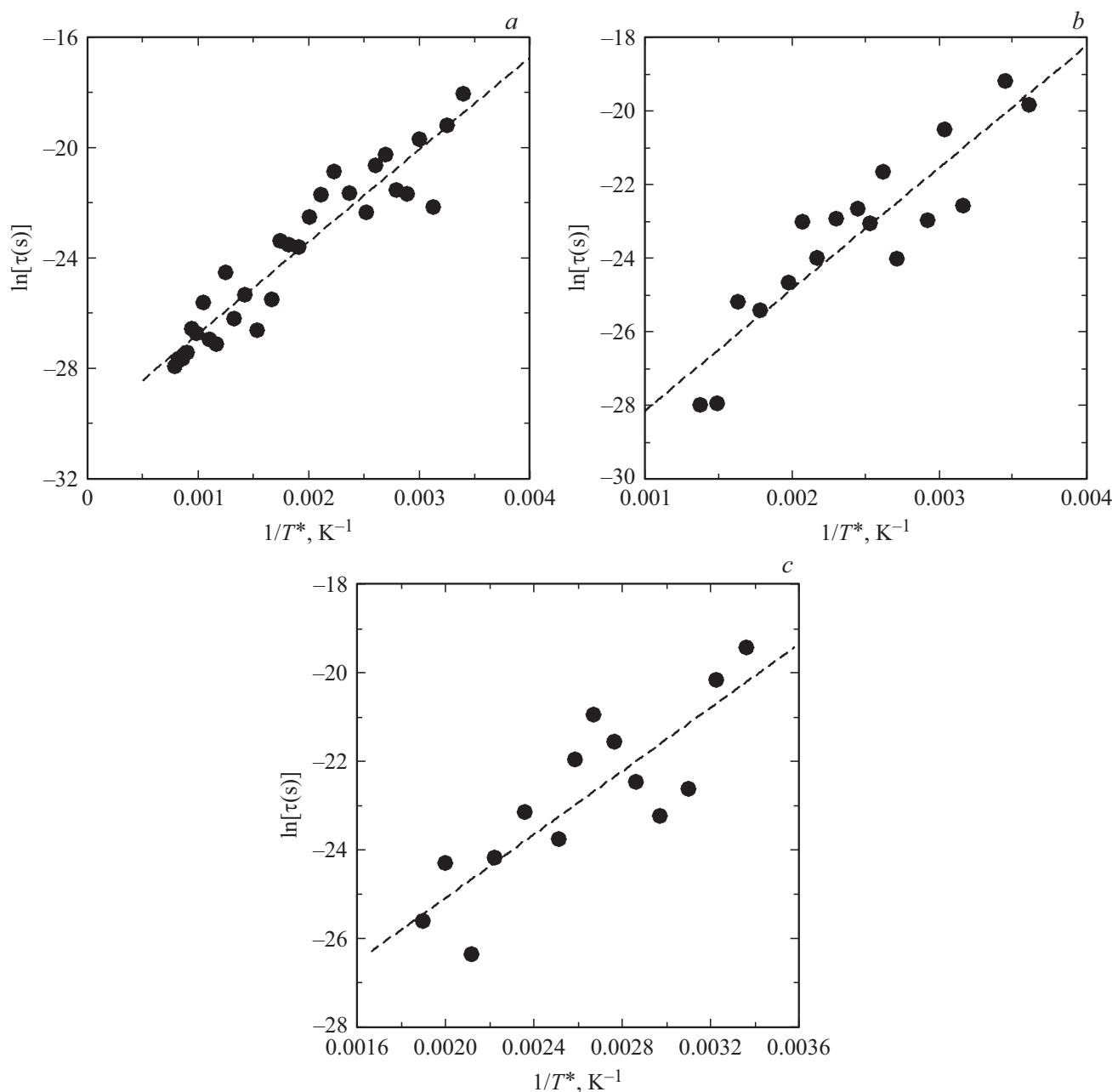


Рис. 6. Зависимости времени жизни τ цепочек карбин-карбинофуллеренов C_{20} от обратной температуры T^* (см. текст). Точки — результаты численного счета. Пунктирные линии — линейные аппроксимации методом наименьших квадратов. Димер (*a*), тример (*b*) и тетрамер (*c*).

ратуре для тетрамера $\tau \sim 1$ ns. Понижение температуры до $T = 77$ К приводит к увеличению τ до шести лет.

Низкая температурная устойчивость цепочек со свободными граничными карбинофуллеренами обусловлена высокой гибкостью этих структур. Просмотр конфигураций атомных кластеров перед возникновением первого дефекта показывает сильный изгиб цепочки. При изгибе цепочки атом карбинофуллерена, соседний с полюсным (на рис. 2, *b* это атомы, эквивалентные атомам 1 и 5) приближается к промежуточному атому (атом 3 на рис. 2, *b*), вследствие чего появляется возмож-

ность переключения связи атомов 4–5 на атомы 3–5). Для подавления такого механизма дефектообразования перспективными в последующих работах могут быть несколько подходов: во-первых фиксация краев или растяжение цепочек. Как показали представленные расчеты, цепочки имеют большой запас прочности к растяжению, которое удаляет соседние карбинофуллерены друг от друга, что препятствует их слиянию. Вторым способом повышения термической устойчивости могло бы стать увеличение количества промежуточных атомов углерода между соседними карбинофуллеренами.

4. Заключение

Проведенное в настоящей работе теоретическое исследование цепочек карбин-карбинофуллеренов C₂₀ показало, что эти структуры обладают высокой упругостью и выдерживают растяжение до 25–40%, что в некоторых случаях превышает соответствующее значение для нанотрубок. При превышении предельной деформации происходит разрыв связей между соседними карбинофуллеренами. Однако устойчивость таких цепочек к нагреву невысока. При температуре жидкого азота время жизни цепочек карбин-карбинофуллеренов составляет несколько лет. Их термический распад протекает путем слияния соседних карбинофуллеренов в цепочке. Для подавления такого механизма образования дефектов и поиска более устойчивых структур в дальнейшем представляет интерес изучить термический распад напряженных цепочек, в том числе цепочек с двумя атомами углерода, разделяющими соседние карбинофуллерены. Благодаря необычному строению карбинофуллеренов и их способности к упругой деформации, дальнейший дизайн цепочек и кристаллов на их основе поможет создать новые углеродные материалы с экстремальными механическими свойствами.

Финансирование работы

Работа поддержана Российским фондом фундаментальных исследований (грант № 18-02-00278-а) и выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования РФ в рамках Программы повышения конкурентоспособности Национального исследовательского ядерного университета „МИФИ“.

Конфликт интересов

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

Список литературы

- [1] K.S. Novoselov, A.K. Geim, S.V. Morozov, D. Jiang, Y. Zhang, S.V. Dubonos, I.V. Grigorieva, A.A. Firsov. *Science* **306**, 666 (2004).
- [2] S. Iijima. *Nature*, **354**, 56 (1991).
- [3] H.W. Kroto, J.R. Heath, S.C. O'Brien, R.F. Curl, R.E. Smalley. *Nature* **318**, 162 (1985).
- [4] W. Kratschmer, L.D. Lamb, K. Fostiropoulos, D.R. Huffman. *Nature* **347**, 354 (1990).
- [5] А.В. Елецкий, Б.М. Смирнов. *УФН* **165**, 977 (1995).
- [6] A.A. Farajian, M. Mikami. *J. Phys.: Condensed Matter* **13**, 8049 (2001).
- [7] K.S. Grishakov, K.P. Katin, M.M. Maslov. *Diamond Rel. Mater* **84**, 112 (2018).
- [8] Y. Miyamoto, M. Saito. *Phys. Rev. B* **63**, 161401 (2001).
- [9] Л.А. Опенов, И.В. Давыдов, А.И. Подливаев. *Письма в ЖЭТФ* **85**, 418 (2007).
- [10] R. Ehlich, P. Landenberger, H. Prinzbach. *J. Chem. Phys.* **115**, 5830 (2001).
- [11] K.P. Katin, M.M. Maslov. *Adv. Cond. Matter Phys.* **2015**, 754873 (2015).
- [12] М.М. Маслов, К.П. Катин, А.И. Авхадиева, А.И. Подливаев. *Хим. физика* **33**, 27 (2014).
- [13] T. Yildirim, P.M. Gehring, D.A. Neumann, P.E. Eaton, T. Emrick. *Phys. Rev. Lett.* **78**, 4938 (1997).
- [14] Е.А. Беленков, И.В. Шахова. *ФТТ* **53**, 2265 (2011).
- [15] А.И. Подливаев, Л.А. Опенов. *ФТТ* **61**, 604 (2019).
- [16] А.И. Подливаев, Л.А. Опенов. *ФТТ* **61**, 793 (2019).
- [17] E.M. Pearson, T. Halicioglu, W.A. Tiller. *Phys. Rev. A* **32**, 3030 (1985).
- [18] C. Xu, G.E. Scuseria. *Phys. Rev. Lett.* **72**, 669 (1994).
- [19] J. Jellinek, A. Goldberg. *J. Chem. Phys.* **113**, 2570 (2000).
- [20] С.Е. Клотс. *Z. Phys. D* **20**, 105 (1991).
- [21] J.V. Andersen, E. Bonderup, K. Hansen. *J. Chem. Phys.* **114**, 6518 (2001).
- [22] М.М. Маслов, А.И. Подливаев, К.П. Катин. *Mol. Simul.* **42**, 305 (2016).
- [23] К.П. Катин, М.М. Маслов. *J. Phys. Chem. Solids* **108**, 82 (2017).
- [24] К.П. Катин, S.A. Shostachenko, A.I. Avhadieva, M.M. Maslov. *Adv. Phys. Chem.* **2015**, 506894 (2015).
- [25] А.И. Подливаев, Л.А. Опенов. *ФТТ* **60**, 160 (2018).
- [26] Л.А. Опенов, А.И. Подливаев. *ФТТ* **60**, 795 (2018).
- [27] К.П. Катин, А.И. Подливаев. *ФТТ* **52**, 407 (2010).
- [28] Л.А. Опенов, А.И. Подливаев. *Письма в ЖЭТФ* **109**, 746 (2019).
- [29] Л.А. Опенов, А.И. Подливаев. *ФТП* **53**, 724 (2019).
- [30] И.Ю. Долинский, К.П. Катин, К.С. Гришаков, В.С. Прудковский, Н.И. Каргин, М.М. Маслов. *ФТТ* **60**, 816 (2018).
- [31] А.И. Подливаев, Л.А. Опенов. *ФТТ* **50**, 954 (2008).

Редактор К.В. Емцев