Uzbek Journal of Physics
Vol.21(№4) 2019 PP.265-266

ПИСЬМА В РЕДАКЦИЮ

О КРИТИЧЕСКОЙ ТЕМПЕРАТУРЕ СВЕРХПРОВОДЯЩЕГО ФУЛЛЕРЕНА C_{28}

Б.И. Хамдамов, Н.А. Тайланов, И. Нуриддинов

Джизакский политехнический институт, Джизак, Узбекистан
Институт ядерной физики АН РУз, Ташкент, Узбекистан
(Получена 13.02.2019)

Мақолада ўта-ўтказувчан C_{28} fullerenning критик температурасининг қиймати электрон-фонон ўзаро тасир потенциалига асосланган ҳолда ҳисобланган.

В данной работе получено численное значение критической температуры фуллерена C_{28} на основе потенциала электрон-фононного взаимодействия. Приведены примеры возможного применения фуллеренов в различных областях техники.

In the present paper the numerical value of the critical temperature of fullerene C_{28} has been determined on the basis of electron-phonon interaction potential.

Одной из основных задач направленного поиска новых углеродных фуллеренов является установление фундаментальных зависимостей энергетической стабильности данных нанокластеров от их размера, топологии и состава, основываясь на детальном изучении их электронно-энергетических состояний. В настоящее время предложено большое число модельных схем и выполнено значительное количество квантовохимических расчетов конкретных фуллеренов, позволяющих связать проблему их устойчивости со спецификой их электронного строения и типом межатомных взаимодействий. В частности, предложено т.н. правило изолированных пятиугольников (ПИП), которое запрещает образование комбинации пятиугольных граней, разделенных ребром [1]. Согласно этому правилу, фуллерены с n<60 являются неустойчивыми, хотя есть сообщение о синтезе фуллерена C_{32} [2]. С помощью простых топологических методов показана возможность существования большого числа иных фуллеренов, включая и наименьший из них, правильный додекаэдр C_{20}. В связи с этим большой интерес представляет проблема формирования структуры, электронного энергетического состояния и способов стабилизации малых фуллеренов (C_{28}, C_{32}, C_{40}) как “пограничных” в семействе клеточных углеродных нанокластеров.

В настоящей работе исследованы сверхпроводящие свойства фуллерена C_{28}. Определена температура сверхпроводящего перехода, используя потенциал электрон-фононного взаимодействия. Оптимизированная структура C_{28} предс-тавляет собой полиэдр с тремя группами неэквивалентных С атомов (см. рисунок) [3]. Верхние заселенные несвязывающие орбитали C_{28} локализованы на четырех С атомах, составляющих одну из упомянутых атомных групп (С1) углеродной клетки.

В определенных условиях молекулы C_{28} имеют свойство упорядочиваться в пространстве, они располагаются в узлах кристаллической решетки, иными

словами, фуллерен образует кристалл, называемый фуллеритом. Чтобы молекулы C_{28} систематично разместились в пространстве, как и их атомы, они должны связаться между собой. Связь между молекулами в кристалле обусловлена наличием слабой ван-дер-ваальсовой силы. Это объясняется тем, что в электрически нейтральной молекуле отрицательный заряд электронов и положительный заряд ядра рассредоточены в пространстве, вследствие чего молекулы способны поляризовать друг друга, т.е. они приводят к смещению в пространстве центров положительного и отрицательного зарядов, что обуславливает их взаимодействие [3].

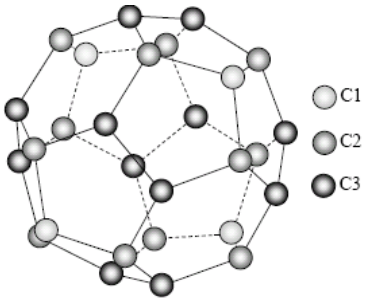


Рисунок. Структура кристалла C_{28}.

Потенциал электрон-фононного взаимодействия можно представить в виде [4]

$$V_{ep} = \frac{1}{g^2}\sum_{\nu}\frac{1}{\omega_{\nu}^2}\sum_{\alpha\alpha'}^{g}|\langle\alpha|\sum_{i}^{N}\varepsilon_{\nu}^{i}\nabla_i V|\alpha'\rangle|^2,$$

где α и α' – молекулярные уровни, g – постоянный параметр. Матричный элемент численно оценивался по конечно-дифференциальной схеме и составил 181 МэВ. Тогда, используя выражение для константы электрон-фононного взаимодействия

$$\lambda = N(0)V_{ep},$$

легко вычислить температуру сверхпроводящего перехода. Хорошо известно [4], что температура сверхпроводящего перехода зависит от постоянной решетки фуллерена. Максимальная температура перехода фуллеренов щелочных металлов немного выше 30 К (н-р, для молекулы фуллерена C_{60}), но для сложного состава она превышает 40 К. Тогда уравнение Макмиллана [5] для определения температуры сверхпроводящего перехода можно представить в виде

$$T_c = \frac{\omega_{\ln}}{1.2}\exp\left[\frac{1.04(1+\lambda)}{\lambda-\mu^*(1+0.62\lambda)}\right].$$

Здесь $\omega_{\ln} = \frac{2}{\lambda}\int_0^{\infty} d\omega\frac{\alpha^2F(\omega)}{\omega}\ln\omega$ – фононная частота, $\mu^* = \frac{\mu}{1+\mu\ln(\varepsilon_F/\omega_{\ln})}$ – кулоновский псевдопотенциал [6].

Таким образом, задача вычисления температуры сверхпроводящего перехода T_c сводится к расчету величин λ, $\omega_{\ln}$ и μ^*. Для типичных значений параметров $\omega_{\ln}=10^3$ K, $\lambda=1.2$ и $\mu^*\approx0.22$, $N(0)=5$ эВ/спин мы имеем для температуры сверхпроводящего перехода значение $T_c(C_{28}) \approx 8.03\ T_c(C_{60})$.

ЛИТЕРАТУРА

1. В.И. Соколов, И.В. Станкевич, Успехи химии **62**, № 5, 455 (1993).
2. Новые направления в исследованиях фуллеренов, УФН **164**, № 9, 1007 (1994).
3. А.В. Елецкий, Б.М. Смирнов, УФН **165**, №9, 977 (1995).
4. D. Rainer, Prog. Low Temp. Phys. **10**, 371 (1986).
5. W.C. McMillan, Phys. Rev. **167**, 331 (1968).
6. G.M. Eliashberg, JETP **28**, 996 (1960).