

О.В. Філоненко, В.В. Лобанов

## Теоретичне дослідження фулереноподібних кремнеземних молекул і їх комплексів із $C_{60}$

*Інститут хімії поверхні ім. О.О. Чуйка НАН України,  
вул. Ген. Наумова 17, 03164, Київ, Україна, тел. (044)422-96-60, [filonenko\\_ov@ukr.net](mailto:filonenko_ov@ukr.net)*

Методом функціоналу густини (обмінно-кореляційний функціонал B3LYP, базис 6-31 G\*\*) досліджені геометричні та енергетичні характеристики двох типів сфероподібних кремнеземних молекул: гідроксильованих  $(SiO_2)_N(H_2O)_{N/2}$  і повністю координованих  $(SiO_2)_N$ . Показано можливість використання молекули  $C_{60}$  як темплату для синтезу кремнеземної фулереноподібної молекули  $(SiO_2)_{60}(H_2O)_{30}$ .

**Ключові слова:** кремнеземні фулереноподібні молекули, структура, метод функціонала густини.

*Стаття постуила до редакції 22.01.2010; прийнята до друку 15.12.2010.*

### Вступ

Один із перспективних напрямків сучасної хімії наноматеріалів полягає в розробці нових методів їх синтезу та дослідженні властивостей одержаних структур. Це обумовлено істотною зміною фізико-хімічних характеристик речовини при переході від макро- до наносистем. Так, параметри кристалічної ґратки, теплоємність, температура топлення і електропровідність нанокластерів залежать від їх характеристичних розмірів (R) і при  $R \rightarrow \infty$  мають своєю границею значення відповідних властивостей макрокристалів та аморфних зразків. Крім цього, в наносистемах з'являються нові оптичні, магнітні та електронні характеристики, змінюються реакційна і каталітична здатність [1].

Серед наноматеріалів, створених в останні роки, особливий інтерес викликають такі наноструктурні різновиди речовини, як нанотрубки [2] та фулерени [3], які мають порожнисту циліндричну або каркасну форму відповідно. Така структурованість, окрім нанометрових розмірів, обумовлює нові властивості речовин, які можуть бути використані при створенні електронних приладів, паливних елементів, каталізаторів з підвищеними експлуатаційними характеристиками. На сьогодні синтезовано низку фулереноподібних молекул на основі BN, дихалькогенідів d-металів,  $NiCl_2$  [4 – 6] та оксидів d-металів [7].

Оскільки, силіцій є повним електронним аналогом вуглецю, для нього також можна було б очікувати існування сполук подібної сферичної та тубулярної структури. Однак, зважаючи на невелику енергію зв'язку Si-Si (2,3 eV), фулереноподібні

аналоги слід шукати поміж силіційвмісних сполук, в яких деяка частина атомів силіцію заміщена іншими атомами. Серед зв'язків Si-El найвища енергія притаманна зв'язкам Si-F (5,6 eV) та Si-O (3,8 eV). Приймаючи до уваги одновалентність фтору та двовалентність кисню, можна припустити, що найбільш вірогідно побудувати аналоги фулеренів та вуглецевих нанотрубок з діоксиду силіцію. Така структурна аналогія ставить питання про можливість існування кремнезему у вигляді ізольованих молекул. Кремнеземні наночастинки, які являють собою валентно-насичені молекули, аналогічно вуглецевим фулеренам і нанотрубкам можуть мати властивості важливі для створення елементної бази мікроелектроніки. В [8 – 16] описані гіпотетичні кластери на основі діоксиду силіцію: молекулярні кільця; повністю координовані сфероподібні замкнуті комірки; нанопори; нанодропи; нанотрубки тощо.

В цій роботі наведені результати теоретичного розрахунку властивостей фулереноподібних кремнеземних молекул, проаналізовані можливі принципи побудови найбільш стабільних кремнеземних структур, виходячи з їх аналогії з структурою алотропної форми вуглецю – фулеренів.

### I. Метод розрахунку

Розрахунки виконані методом функціоналу густини з гібридним обмінно-кореляційним функціоналом B3LYP і базисним набором 6-31 G\*\* в рамках пакету програми PC GAMESS (версія 7.1) [17]. Дана методика апробована в низці робіт [15, 18 – 20], присвячених вивченню кремнеземних

систем, і показано добре узгодження з експериментом теоретично розрахованих величин.

## II. Результати та їх обговорення

Пустотілі сферичні фулереноподібні молекули, структурними елементами яких, як і у випадку кристалічних та аморфних модифікацій діоксиду силіцію, є силіцій-кисневі тетраедри, були побудовані з використанням структурних мотивів молекул вуглецевих фулеренів. Згідно з теоремою Ейлера [21], існування таких замкнених багатогранників з  $n$  вершинами забезпечується наявністю 12 п'ятикутних граней. Число шестикутних граней може змінюватись в залежності від радіуса сфери, при цьому кількість вершин багатогранника завжди залишається парною. Тому найменшою із всіх можливих фулеренів є молекула, що складається з 12 п'ятикутників ( $n = 20$ ) і має форму правильного додекаедра. При збільшенні числа шестикутників можна гіпотетично сконструювати низку фулереноподібних молекул з  $n = 24, 26, 28, \dots, 60, \dots, 70, \dots$ . В даній роботі за основу обрано багатогранники що складаються із 20, 24, 28, 60 вершин. Аналогічно атомам вуглецю в фулеренах, атоми Si у вихідних структурах молекул розміщувались у вершинах правильних п'ятикутників та шестикутників, які вкривають поверхню сфери або сфероїда, на відстанях 0,3 - 0,35 нм один від одного. Атоми кисню займали середнє положення Si...Si відстаней. При такій побудові кожний атом силіцію виявляється валентно-ненасиченим, для ліквідації чого використано два підходи, які привели до одержання принципово різних молекулярних форм кремнезему.

При першому підході до кожного атома силіцію приєднувалась гідроксильна група, що притаманно поверхневим атомам силіцію всіх кристалічних і аморфних форм кремнезему. В кінцевому результаті одержано ряд молекул з брутто-формулою  $(SiO_2)_N(H_2O)_{N/2}$ , ( $N = 20, 24, 28, 60$ ), характерною особливістю яких є наявність гідроксильних груп біля кожного атома силіцію (рис. 1, а). Такі утворення можна розглядати як типові молекули завдяки валентній насиченості всіх їх атомів і скінченності розмірів, а з іншого боку, як кремнеземні нанокластери, зважаючи на їхні розміри.

У рамках другого підходу валентна насиченість стану атомів силіцію досягається введенням системи дисилоксанових зв'язків, що приводить до молекул складу  $(SiO_2)_N$  ( $N = 20, 24, 28, 60$ ) (рис. 1, б). Такі молекули мають також сфероподібну порожнисту структуру брутто формули  $(SiO_2)_N$  з ідеальною для діоксиду силіцію стехіометрією Si:O = 1:2. Вона теоретично притаманна діоксиду силіцію, але її ніколи не можна досягнути для кристалічних і аморфних зразків кремнезему, поверхня яких несе гідроксильний шар.

Встановлено, що найбільш стійкими серед ізомерів молекул  $(SiO_2)_N(H_2O)_{N/2}$  є структури, в яких всі гідроксильні групи орієнтовані назовні (рис. 1, а). Для них слід очікувати надзвичайно високої гідрофільності або, у випадку відповідної хімічної модифікації, майже ідеальної гідрофобності.

Структурні параметри рівноважних конфігурацій кремнеземних сфероподібних молекул наведено в табл. 1 та 2.

З табл. 1 видно, що валентні кути між зв'язками атомів силіцію та довжини Si-O зв'язків для гідроксильованих кремнеземних молекул  $(SiO_2)_N(H_2O)_{N/2}$  практично не залежать від N, а їх

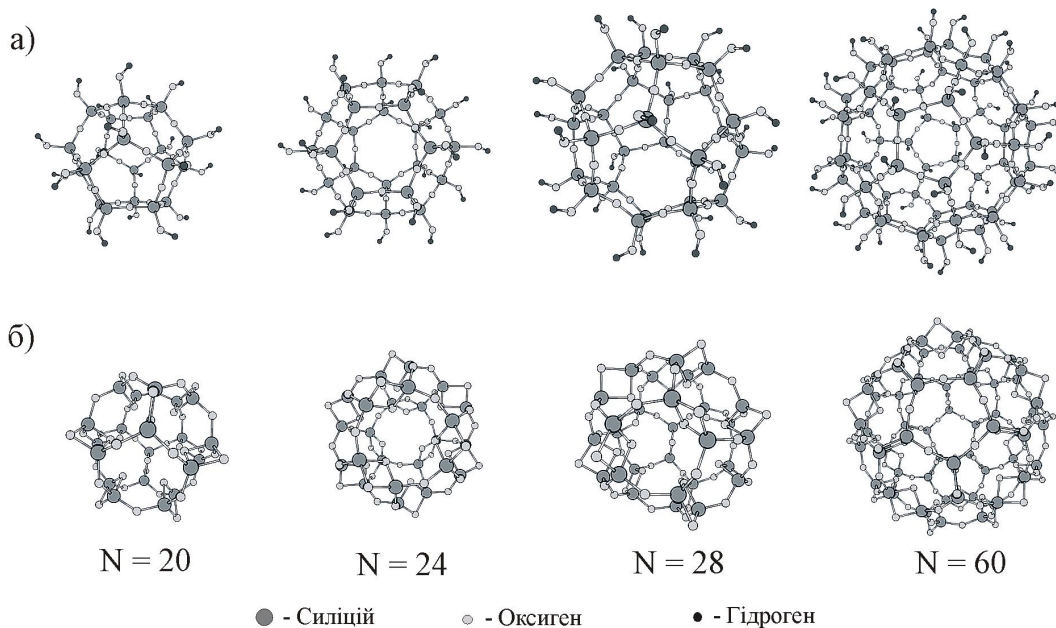


Рис. 1. Сфероподібна структура досліджених кремнеземних молекул:  
а)  $(SiO_2)_N(H_2O)_{N/2}$ ; б)  $(SiO_2)_N$ .

**Таблиця 1**

Структурні параметри рівноважних конфігурацій кремнеземних сфероподібних молекул  $(\text{SiO}_2)_N(\text{H}_2\text{O})_{N/2}$

Структурний параметр	N				$\beta$ -квистобаліт [22], експ.	$\alpha$ -кварц [22], експ.
	20	24	28	60		
R (Si–O), нм	0,165	0,165	0,165	0,165	0,1608	0,161
R (Si–O), нм (в Si–OH групі)	0,168	0,168	0,168	0,169	0,171	
d (Si...Si)*, нм	0,33	0,33	0,33	0,32	0,31	
$\angle$ Si–O–Si, град.	175,9	173,8	175,1	164,5	180,0	144
$\angle$ O–Si–O, град.	109,7	109,6	109,8	109,4	109,5	110
$\angle$ Si–O–H, град.	128	127,9	126,8	124,8	105,0	

\* відстань між атомами силіцію в суміжних тетрадрах

**Таблиця 2**

Структурні параметри рівноважних конфігурацій кремнеземних сфероподібних молекул  $(\text{SiO}_2)_N$

Структурний параметр		N				w-кремнезем (розрах.) [23]	w-кремнезем (експ.) [23]	
		20	24	28	60			
Силоксановий місток	R (Si–O), нм	0,169	0,168	0,167	0,166			
	$\angle$ Si–O–Si, град.	132	136	137	152			
	$\angle$ O–Si–O, град.	111	110	111	109,6			
Дисилоксановий місток	R (Si–O), нм	v*	0,172	0,173	0,174	0,174	0,176	0,184
		z*	0,181	0,18	0,179	0,178		
	$\angle$ Si–O–Si, град.	v*	97,5	96,9	95,7	94,9	94,02	79,6
		z*	91,5	91,8	92,5	92,6		
	$\angle$ O–Si–O, град.		85,4	85,6	85,9	86,2	122,4	100,4
d (Si...Si), нм		0,259	0,258	0,258	0,257	0,257	0,187	

v\* - R (Si–O),  $\angle$ Si–O–Si в містку  $\text{Si}_2\text{O}_2$  розміщені на внутрішній стороні молекул;

z\* - R (Si–O),  $\angle$ Si–O–Si в містку  $\text{Si}_2\text{O}_2$  розміщені на зовнішній стороні молекул.

значення є близькі до відповідних значень для кристалічної модифікації кремнезему –  $\beta$ -квистобаліту. Стійкість гідроксильованих сфероподібних молекул визначається гнучкістю кута  $\angle$ Si–O–Si, який неістотно відхиляється від відповідного кута в  $\beta$ -квистобаліті.

Валентні кути O–Si–O та довжини зв'язків Si–O для повністю координуваних молекул (табл. 2) (окрім тих, що описують місток  $\text{Si}_2\text{O}_2$ ) неістотно відрізняються від аналогічних структурних параметрів  $\beta$ -квистобаліту (109,5°, 0,1608 нм відповідно). Довжина зв'язку Si–O в містках  $\text{Si}_2\text{O}_2$  молекул  $(\text{SiO}_2)_N$ , особливо ті, що розміщені на зовнішній стороні молекул, значно відхиляються від рівноважного значення для  $\alpha$ -кварцу (0,161 нм), що вказує на напруженість даних структур. Розраховані структурні параметри рівноважних конфігурацій

повністю координуваних  $(\text{SiO}_2)_N$  (N = 20, 24, 28, 60) молекул відносно непогано узгоджуються з експериментальними даними для w-кремнезему, складовими ланками якого є  $\text{Si}_2\text{O}_2$ -кільця.

Енергії зв'язування ( $E_{\text{св}}$ ) (атомізації ( $\dot{A}_{\text{ао}}$ )) обчислено як різницю між загальною енергією кремнеземної молекули та енергією ізольованих атомів, що входять до складу даної молекули.

$$E_{\text{св}} = E [(\text{SiO}_2)_N] - NE [\text{Si}] - 2NE [\text{O}]$$

$$E_{\text{св}}^* = E [(\text{SiO}_2)_N(\text{H}_2\text{O})_{N/2}] - NE [\text{Si}] - (2N + \frac{N}{2})E [\text{O}] - NE [\text{H}]$$

З табл. 3, в якій наведені розраховані  $\dot{A}_{\text{ао}}$  і  $E_{\text{св}}$  в перерахунку на одну формульну одиницю, видно, що молекули з OH групами стабільніші відповідних структур, що містять дисилоксанові зв'язки.

Експериментально виміряна енергія зв'язування

Енергії атомізації та енергії зв'язування (в перерахунку на одну формульну одиницю) молекул (SiO<sub>2</sub>)<sub>N</sub>(H<sub>2</sub>O)<sub>N/2</sub> і (SiO<sub>2</sub>)<sub>N</sub>

Молекула	$\dot{A}_{\text{a0}}$ (eB)	$E_{\text{ca}}(\text{\AA}) / N(\text{SiO}_2)$ $E_{\text{ca}}^*(\text{\AA}) / N(\text{SiO}_2)(\dot{I}_2\hat{I})_{1/2}$
SiO <sub>2</sub>	8,598	-8,598
(SiO <sub>2</sub> ) <sub>20</sub>	249,897	-12,494
(SiO <sub>2</sub> ) <sub>24</sub>	303,480	-12,645
(SiO <sub>2</sub> ) <sub>28</sub>	356,923	-12,747
(SiO <sub>2</sub> ) <sub>60</sub>	781,438	-13,023
(SiO <sub>2</sub> ) <sub>20</sub> (H <sub>2</sub> O) <sub>10</sub> *	373,855	-18,693
(SiO <sub>2</sub> ) <sub>24</sub> (H <sub>2</sub> O) <sub>12</sub> *	448,571	-18,690
(SiO <sub>2</sub> ) <sub>28</sub> (H <sub>2</sub> O) <sub>14</sub> *	523,504	-18,696
(SiO <sub>2</sub> ) <sub>60</sub> (H <sub>2</sub> O) <sub>30</sub> *	1120,20	-18,670
20ст. од.w-SiO <sub>2</sub>	256,462	-12,823
$\alpha$ -кварц (експ.)		-19,2

для об'ємної фази найбільш стійкої кристалічної модифікації кремнезему –  $\alpha$ -кварцу становить - 19,2 eB/SiO<sub>2</sub> [12]. Енергія зв'язування молекул (SiO<sub>2</sub>)<sub>N</sub> значно нижча, що вказує на напруженість даних структур, а енергія зв'язування молекул (SiO<sub>2</sub>)<sub>N</sub>(H<sub>2</sub>O)<sub>N/2</sub> неістотно відрізняється від величини 19,2 eB.

Як одержати такі фулереноподібні кремнеземні молекули? Найбільш простий метод – використання відомих стабільних молекул, наприклад вуглецевих фулеренів, як шаблонів. Так, застосовуючи вуглецеві нанотрубки, як темплати було отримано кремнеземні нанотрубки [24].

Для перевірки можливості використання

молекули C<sub>60</sub> як темплату у синтезі фулереноподібних кремнеземних молекул (SiO<sub>2</sub>)<sub>60</sub>(H<sub>2</sub>O)<sub>30</sub> та (SiO<sub>2</sub>)<sub>60</sub> проведено розрахунок рівноважної просторової структури і електронної будови двох систем:

а) молекула фулерену вкрита шаром силіцій-кисневого каркасу, що відповідає структурі гідроксильованої кремнеземної молекули (SiO<sub>2</sub>)<sub>60</sub>(H<sub>2</sub>O)<sub>30</sub> (рис. 2, а);

б) силіцій-кисневим каркасом молекули фулерену є повністю координована молекула (SiO<sub>2</sub>)<sub>60</sub> (рис. 2, б).

Оскільки відомо, що метод функціоналу густини досить неточно описує міжмолекулярну взаємодію,

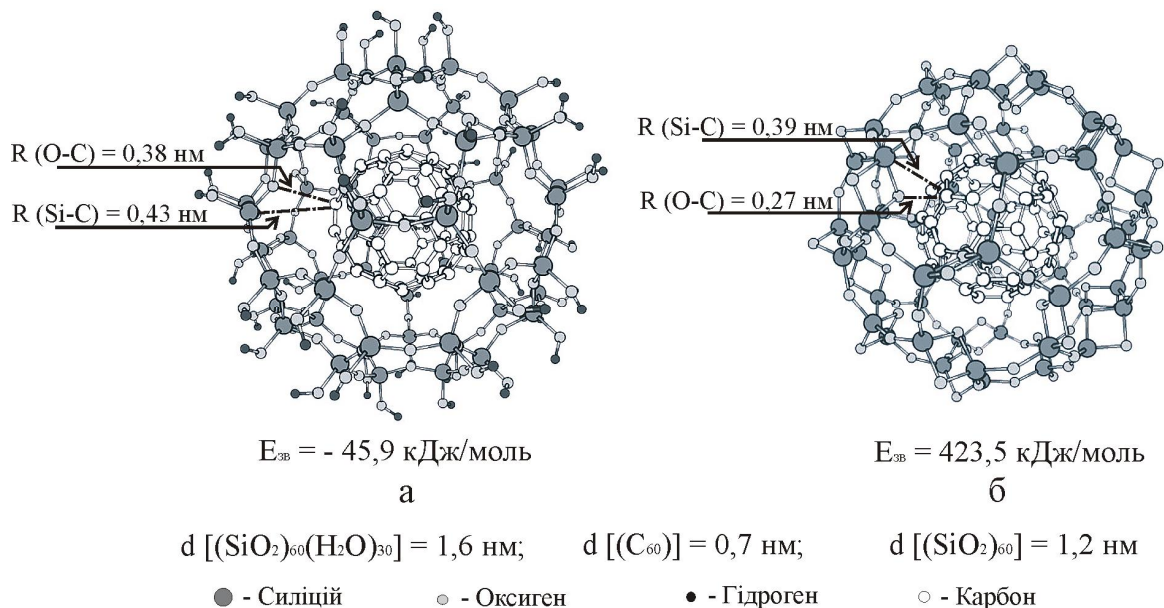


Рис. 2. Рівноважна просторова структура супрамолекулярних утворень (SiO<sub>2</sub>)<sub>60</sub>(H<sub>2</sub>O)<sub>30</sub>@C<sub>60</sub> та (SiO<sub>2</sub>)<sub>60</sub>@C<sub>60</sub>.

то обчислення виконано методом СУП МО ЛКАО в базисі 6-21G.

Енергія зв'язування ( $E_{ca}$ ) системи  $(SiO_2)_{60}(H_2O)_{30}@C_{60}$  складає - 45,9 кДж/моль, що свідчить про самочинність відповідного процесу. Основний вклад в  $E_{ут.}$  вносять дві складові: компонента обумовлена переносом заряду та компонента дисперсійної взаємодії. Розрахунки засвідчили, що енергія вищої зайнятої молекулярної орбіталі молекули  $C_{60}$  складає -3,7 еВ, а енергія нижчої вакантної молекулярної орбіталі кремнеземної молекули 3,8 еВ. Зважаючи на велику різницю в положенні цих рівнів (7,5 еВ) слід очікувати, що перенос заряду між складовими комплексу буде незначний. Дійсно, при утворенні комплексу з молекули фулерену на кремнеземний каркас переноситься 0,22 ат. од., що в перерахунку на один атом складає 0,004. Це є свідченням того, що основний вклад в енергію утворення вносить дисперсійна взаємодія.

Додатковий аргумент на користь цього висновку можна отримати із аналізу густини станів. Повна густина станів будувалась із дискретного енергетичного спектру одноелектронних рівнів молекул  $C_{60}$ ,  $(SiO_2)_{60}(H_2O)_{30}$ , та утвореного з них

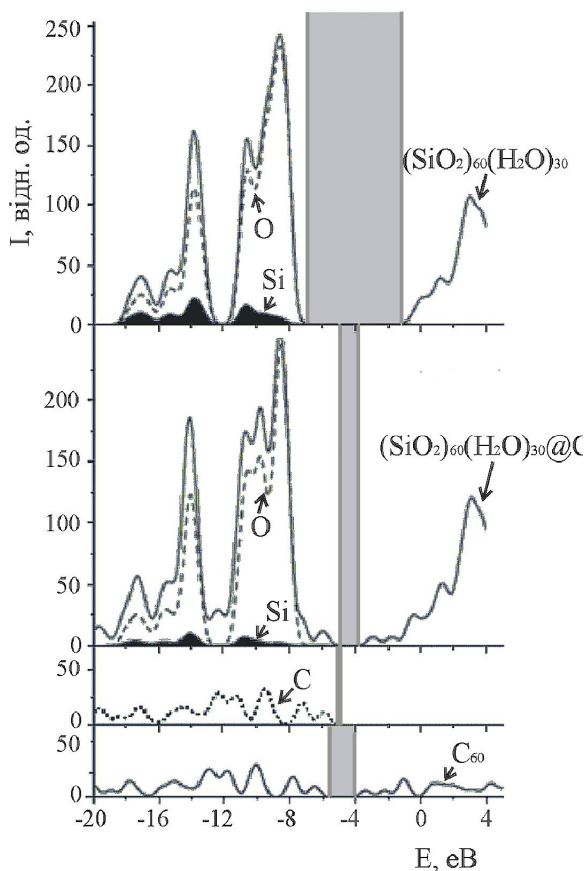
комплексу. Кожен з цих рівнів розмивався гаусовим розподілом з півшириною на піввисоті 0,4 еВ, а повна інтенсивність густини станів нормувалась на 1.

Розподіли повних густин електронних станів розглянутих систем (рис. 3) мають певні відмінності, а саме при переході від складових молекул  $(SiO_2)_{60}(H_2O)_{30}$  та  $C_{60}$  до комплексу  $(SiO_2)_{60}(H_2O)_{30}@C_{60}$  змінюється ширина енергетичної щільності та спостерігається зміна профілю валентної зони в області -12 еВ -9 еВ.

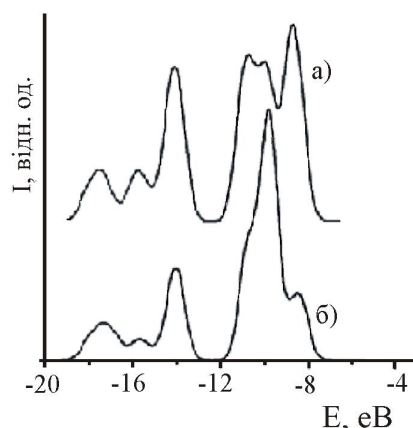
Для пояснення цих явищ та оцінки вкладів орбіталей складових атомів комплексу в його повну густина електронних станів побудовані парціальні густини станів атомів Si (забарвлена область спектру), O (штрихова лінія) та C (пунктирна лінія) (рис. 3). При розгляді парціальних густин електронних станів атомів C молекули  $C_{60}$  та комплексу  $(SiO_2)_{60}(H_2O)_{30}@C_{60}$  встановлено, що структура валентної зони при переході від  $C_{60}$  до комплексу не змінюється, а положення краю валентної зони зсувається в бік вищих енергій. Це зумовлено тим, що молекула  $C_{60}$  знаходиться в сферичному електростатичному полі зовнішньої молекули. Цей зсув тотожний зсуву енергій d-орбіталей центрального атома комплексу, що розглядається в теорії кристалічного поля [25].

З парціальних густин електронних станів атомів Si та O молекули  $(SiO_2)_{60}(H_2O)_{30}$  і комплексу  $(SiO_2)_{60}(H_2O)_{30}@C_{60}$  (рис. 3) видно, що основний вклад у зміну профілю валентної зони комплексу вносять атоми кисню. Це можна пояснити появою нееквівалентних атомів O у каркасі кремнеземної молекули при утворенні комплексу. Аналіз локальних густин електронних станів атомів кисню розміщених всередині та зовні сферичного силіцій-кисневого каркасу молекули (рис. 4) підтверджує те, що дана зміна спричинена різною відстанню атомів кисню до центральної молекули  $C_{60}$ .

Важливим чинником, що забезпечує зв'язування



**Рис. 3.** Густина електронних станів для молекул  $C_{60}$  (суцільна лінія);  $(SiO_2)_{60}(H_2O)_{30}$  та комплексу  $(SiO_2)_{60}(H_2O)_{30}@C_{60}$ ; та парціальні густини електронних станів атомів Si (чорна область), O (штрихова лінія) і C в комплексі (пунктирна лінія).



**Рис. 4.** Парціальні електронні густини станів атомів O: (а) – напрямленого всередину сферичного силіцій-кисневого каркасу молекули, (б) – напрямленого ззовні сфери.

в системі  $(SiO_2)_{60}(H_2O)_{30}@C_{60}$ , є гнучкість кута  $\equiv Si-O-Si \equiv$  і жорсткість структури  $C_{60}$ .

У випадку (SiO<sub>2</sub>)<sub>60</sub>@C<sub>60</sub> E<sub>ca</sub> становить - 423,5 кДж/моль, що свідчить про енергетичну невідповідність його утворення. Це можна пояснити жорсткістю каркасів складових молекул, тобто відсуття просторова компліментарність.

(SiO<sub>2</sub>)<sub>60</sub>. Встановлено, що системи з ОН групами більш стійкі в порівнянні з структурами, що містять дисилоксанові зв'язки.

Показано можливість використання в якості темплату молекули C<sub>60</sub> для синтезу кремнеземної фулереноподібної молекули (SiO<sub>2</sub>)<sub>60</sub>(H<sub>2</sub>O)<sub>30</sub>.

## Висновки

Проведені методом функціонала густини розрахунки засвідчили про можливість утворення термодинамічно стійких структур кремнеземних фулереноподібних молекул складу: (SiO<sub>2</sub>)<sub>60</sub>(H<sub>2</sub>O)<sub>30</sub> та

**Філоненко О.В.** – пров. інженер Інституту хімії поверхні ім. О.О. Чуйка НАН України;  
**Лобанов В.В.** – доктор хімічних наук, провідний науковий співробітник Інституту хімії поверхні ім. О.О. Чуйка НАН України.

- [1] И.П. Суздаев, П.И. Суздаев. Нанокластеры и нанокластерные системы. Организация, взаимодействие, свойства // *Успехи химии*, **70** (3), сс. 203-240 (2001).
- [2] Э.Г. Раков. Химия и применение углеродных нанотрубок // *Успехи химии*, **70** (10), сс. 934-973 (2001).
- [3] Р.Е. Смоли. Открывая фуллерены // *УФН*, **168** (3), сс. 323-330 (1998).
- [4] Y.R. Nacohen, R. Popovitz-Biro, Y. Prior, S. Gemming, G. Seifert, R. Tenne. Synthesis of NiCl<sub>2</sub> nanotubes and fullerene-like structures by laser ablation: theoretical considerations and comparison with MoS<sub>2</sub> nanotubes // *Phys. Chem. Phys.*, **5** (8), pp. 1644-1651 (2003).
- [5] R. Popovitz-Biro, N. Sallacan, R. Tenne. CdI<sub>2</sub> nanoparticles with closed-cage (fullerene-like) structures // *J. Mater. Chem.*, **13** (7), pp. 1631-1634 (2003).
- [6] А.Н. Еняшин, А.Л. Ивановский. Расчеты атомной структуры, электронного строения и магнитных свойств неорганических фуллеренов // *Журн. физ. Химии*, **79** (6), сс. 1081-1086 (2005).
- [7] В.В. Ивановская, А.Н. Еняшин, А.Л. Ивановский. Электронное строение фуллереноподобных молекул на основе TiO<sub>2</sub>, SnO<sub>2</sub> и SnS<sub>2</sub>. // *Журн. структурной химии*, **45** (1), с. 158-161 (2004).
- [8] R.Q. Zhang, W.J. Fan. Structures and properties of silicon oxide clusters by theoretical investigations // *J. Cluster Science*, **17** (4), pp. 541-563 (2006).
- [9] S.T. Bromley, M.A. Zwijnenburg, T. Maschmeyer. Fully coordinated silica nanoclusters: (SiO<sub>2</sub>)<sub>N</sub> molecular rings // *Phys. Rev. Lett.*, **90** (3), pp. 035502-1-035502-4 (2003).
- [10] D.J. Zhang, R.Q. Zhang. A structural model of one-dimensional thin silica nanowires // *Chem. Phys. Lett.*, **394** (1-4), pp. 437-440 (2004).
- [11] M.W. Zhao, R.Q. Zhang, S.T. Lee. Stable and extendable cage containing nanosize silica clusters based on three-membered rings // *Phys. Rev. B.*, **69** (15), pp. 153403-1-153403-4 (2004).
- [12] S.T. Bromley. Thermodynamic stability of discrete fully coordinated SiO<sub>2</sub> spherical and elongated nanocages // *Nano Lett.*, **4** (8), pp. 1427-1432 (2004).
- [13] D. Zhang, R.Q. Zhang. Silica nanoarchitectures with tailored pores based on the hybrid three- and four-membered ring // *J. Phys. Chem. B*, **110** (31), pp. 15269-15274 (2006).
- [14] J. Song, M. Choi. Stability of elongated and compact types of structures in SiO<sub>2</sub> nanoparticles // *Phys. Rev B*, **65** (24), pp. 241302-1-241302-4 (2002).
- [15] D. Zhang, G. Guo, C. Liu, R. Q. Zhang. Density functional theory study of geometrical structures and electronic properties of silica nanowires // *J. Phys. Chem. B*, **110** (47), pp. 23633-23636 (2006).
- [16] Л.А. Чернозатонский, П.Б. Сорокин, А.С. Федоров. Энергетические и электронные свойства неуглеродных нанотрубок на основе диоксида кремния // *ФТТ*, **48** (10), с. 1903-1908 (2006).
- [17] A. Granovsky. URL <http://lcc.chem.msu.ru/gran/gamess/index.html>
- [18] B. Civalleri, C. M. Zicovich-Wilson, P. Ugliengo, V. R. Saunders, R. Dovesi. A periodic ab initio study of the structure and relative stability of silica polymorphs // *Chem. Phys. Lett.*, **292** (4-6), pp. 394-402 (1998).
- [19] T.S. Chu, R.Q. Zhang, H.F. Cheung. Geometric and electronic structures of silicon oxide clusters // *J. Phys. Chem. B*, **105** (9), pp. 1705-1709 (2001).
- [20] S. K. Nayak, B.K. Rao, S.N. Khanna, P. Jena. Atomic and electronic structure of neutral and charged Si<sub>n</sub>O<sub>m</sub> clusters // *J. Chem. Phys.*, **109** (4), pp. 1245-1250 (1998).
- [21] A.D.J. Footballene: A theoretical prediction for the stable, truncated icosahedral molecule C<sub>60</sub> // *J. Am. Chem. Soc.*, **108** (2), pp. 319-321 (1986).
- [22] Y. Xu, W.Y. Ching. Electronic and optical properties of all polymorphic forms of silicon dioxide // *Phys. Rev. B.*, **44** (20), pp. 11048-11059 (1991).
- [23] A.B. Mukhopadhyay, M. Dolg, C. Oligschleger. Ab-initio many-body investigation of structure and stability of two-fold rings in silicates // *J. Chem. Phys.*, **120** (18), pp. 8734-8739 (2004).

- [24] E.A. Whitsitt, A.R. Barron. Silica coated single walled carbon nanotubes // *Nano Lett.*, **3** (6), pp. 775-778 (2003).  
[25] И.Б. Берсукер. Электронное строение и свойства координационных соединений. Введение в теорию. Химия, Л. 288 с. (1986).

O.V. Filonenko, V.V. Lobanov

## Theoretical Study of Silica Fullerene-Like Molecules and Their Complexes With C<sub>60</sub>

*A.A. Chuiko Institute of Surface Chemistry of National Academy of Sciences of Ukraine  
General Naumov Str. 17, 03164 Kyiv, Ukraine, tel.: (044) 422-96-60, e-mail: [filonenko\\_ov@ukr.net](mailto:filonenko_ov@ukr.net)*

The geometric and energy properties of two types of spherical silica molecules: hydroxylated (SiO<sub>2</sub>)<sub>N</sub>(H<sub>2</sub>O)<sub>N/2</sub> and totally coordinated (SiO<sub>2</sub>)<sub>N</sub> have been studied by density functional theory method (exchange-correlation functional B3LYP, basis set 6-31G<sup>\*\*</sup>). A probability has been shown of C<sub>60</sub> molecule usage for synthesis of silica fullerene-like molecule (SiO<sub>2</sub>)<sub>60</sub>(H<sub>2</sub>O)<sub>30</sub> as a template.

**Keywords:** silica fullerene-like molecule, structure, density functional method.