

НОВЫЕ ДАННЫЕ О СТРУКТУРЕ ГИГАНТСКИХ ФУЛЛЕРЕНОВ C_{100} И C_{108}

Коваленко В.И.,^{a,б} Гирфанова Л.Э.,^б Хаматгалимов А.Р.^а

^аИнститут органической и физической химии им. А.Е. Арбузова - обособленное структурное подразделение ФИЦ КазНЦ РАН,
420088, Казань, ул. Ак. Арбузова, 8,
e-mail: koval@iopc.ru

^бКазанский национальный исследовательский технологический университет,
420015, Казань, ул. К. Маркса, 68

Теоретическое моделирование электронного строения молекул фуллеренов,^{1,2} впервые проведено для изомеров 450 (D_3) фуллерена C_{100} и 1771 (D_2) фуллерена C_{108} , подчиняющихся правилу изолированных пентагонов. Представлены данные о распределении простых, двойных и делокализованных π -связей, а также приведены их структурные формулы (Рис.). Выявлено, что молекула изомера 450 (D_3) фуллерена C_{100} имеет открытую электронную оболочку и содержит на полюсах пару эквивалентных субструктур, состоящих из конденсированных феналенил-радикалов. Изомер 1771 (D_2) фуллерена C_{108} имеет закрытую электронную оболочку, молекула его похожа на короткую замкнутую нанотрубку. Априорное распределение связей в соответствии с разработанным подходом подтвердилось проведенными нами квантовохимическими расчетами. Это согласуется также с имеющимися экспериментальными данными для эндодральных и экзодрального производных.

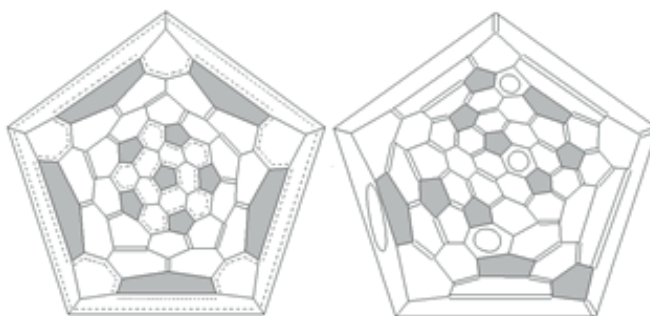


Рисунок. Диаграммы Шлегеля изомера 450 (D_3) фуллерена C_{100} и изомера 1771 (D_2) фуллерена C_{108} . Одиночные и двойные связи обозначены соответственно. Пунктир - радикальные субструктуры, кружки - делокализованные связи в гексагоне.

Показана работоспособность разработанного нами подхода для определения структуры молекул этих гигантских фуллеренов.

Литература

1. Коваленко В.И., Хаматгалимов А.Р. Усп. хим., 2006, 75, 1094.
2. Хаматгалимов А.Р., Коваленко В.И. Усп. хим., 2016, 85, 836.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, проект 18-29-19110МК.