

## БОЛЕЕ ТРЕТИ ЭЛЕМЕНТОВ ПЕРИОДИЧЕСКОЙ СИСТЕМЫ МЕНДЕЛЕЕВА ВНУТРИ И СНАРУЖИ ПРОИЗВОДНЫХ ФУЛЛЕРЕНОВ

Хаматгалимов А.Р.,<sup>а</sup> Коваленко В.И.<sup>а,б</sup>

*<sup>а</sup>Институт 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*

*<sup>б</sup>Казанский национальный исследовательский технологический университет,  
420015, Казань, ул. К. Маркса, 68*

Действительно, уже известны более, чем сорок элементов Периодической системы элементов Д.И. Менделеева, химически связанных с фуллеренами. Часть их - это экзоэдральные фуллерены, которые ковалентно связаны снаружи с молекулой фуллера, а большая часть - эндоэдральные фуллерены содержат внутри молекулы атом(ы), или атомные кластеры, или даже небольшие молекулы. Среди них часть благородных газов, почти все лантаноиды, некоторые актиниды, редкоземельные и переходные металлы. Ограничением является объем молекулярной полости фуллера. Важной особенностью эндоэдральных металлофуллеренов является то, что они образуют семейство производных даже тех фуллеренов, которые не могут быть получены как пустые, то есть собственно фуллерены. К таким относятся фуллерены, не подчиняющиеся правилу изолированных пентагонов, а также весьма интересная группа радикал-фуллеренов, наличие в молекулах которых неспаренных электронов обуславливает их нестабильность. Такой радикал-фуллерен при синтезе стабилизируется катионом металла внутри анионного фуллеренового каркаса. Эта особенность проливает свет на особенности электронной структуры фуллеренов и дает информацию о некоторых нераскрытых ранее стадиях механизма образования фуллеренов. В целом, новые экспериментальные данные часто опережают их трактовку. Квантово-химические расчеты при этом оказываются особенно полезными и служат прогностическими моделями. В нашем докладе мы теоретически рассматриваем особенности структуры молекул фуллеренов, а также их производных, в том числе влияние на стабильность самих фуллеренов.1-3

### Литература

1. Хаматгалимов А.Р., Коваленко В.И. Усп. хим., 2016, 85, 836.
2. Khamatgalimov A.R., Kovalenko V.I. J. Phys. Chem. C, 2018, 122, 3146.
3. Khamatgalimov A.R., Melle-Franco M., Gaynullina A.A., Kovalenko V.I. J. Phys. Chem. C, 2019, 123, 1954.

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