

**ТЕОРЕТИЧЕСКАЯ ХИМИЯ ФУЛЛЕРЕНОВ:  
СОВРЕМЕННОЕ СОСТОЯНИЕ И ПЕРСПЕКТИВЫ**

Сабиров Д.Ш.

*Институт нефтехимии и катализа УФИЦ РАН, 450075, Уфа, РФ, проспект Октября 141,  
e-mail: diozno@mail.ru*

Фуллерены и их производные обладают уникальными свойствами, которые во многом определяются богатой сферической системой  $\pi$ -электронов и регулярностью строения их молекул.<sup>1</sup> Доклад посвящён теоретическому изучению механизмов образования и синтетических трансформаций фуллеренов, предсказанию свойств их соединений, а также изучению изомерного разнообразия органических функциональных производных фуллеренов.

В докладе обсуждаются результаты квантовохимического моделирования реакций фуллеренов с радикалами и молекулами, которые приводят к образованию экзо- и эндодральных производных  $C_{60}$  и  $C_{70}$ . Дается обзор по применению полученных расчётных данных для понимания механизмов антиокислительного и ингибирующего действия фуллеренов на окисление органических соединений<sup>2,3</sup> и радикальные процессы в полимерных<sup>4</sup> и биологических системах (деградация липидных мембран).<sup>5</sup> После обнаружения  $C_{60}$  в межзвёздной среде начался поиск его соединений в астрономических объектах. Обсуждаются возможности образования гидридов фуллеренов  $C_{60}H_x$  с точки зрения термодинамических оценок, строения и поляризуемости  $C_{60}H_x$ .<sup>6</sup>

Дизайн соединений фуллеренов с заданными свойствами включает в себя машинный поиск возможных региоизомеров  $C_{60}X_n$ <sup>7</sup> и прогноз их свойств методами квантовой химии и QSAR. Показаны возможности обеих методологий для выбора акцепторных производных фуллеренов для органических солнечных батарей.<sup>8,9</sup>

Литература

1. Sabirov D.Sh., Osawa E. J. Chem. Inf. Model, 2015, 55, 1576.
2. Sabirov D.Sh., Garipova R.R., Bulgakov R.G. J. Phys. Chem. A, 2013, 117, 13176.
3. Sabirov D., Garipova R., Bulgakov R. Fuller. Nanotube Carbon Nanostruct., 2015, 23, 1051.
4. Диниахметова Д.Р., Фризен А.К., Колесов С.В. Хим. физика, 2017, 36, 75.
5. Sabirov D.Sh., Shepelevich I.S., Tumanskii B.L. Comput. Theor. Chem., 2018, 1138, 84.
6. Sabirov D.Sh., Garipova R.R., Cataldo F. Mol. Astrophys., 2018, 12, 10.
7. Sabirov D.Sh., Terentyev A.O., Bulgakov R.G., J. Phys. Chem. A, 2015, 119, 10697.
8. Sabirov D.Sh. J. Phys. Chem. C, 2016, 120, 24667.
9. Martynova Y., Khairullina V., Biglova Y., Mustafin A. J. Mol. Graph. Model., 2019, 88, 49.

*Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, проект 19-03-00716.*