Тематический раздел: Квантово-химические исследования. Полная исследовательская публикация Регистрационный код публикации: 12-32-12-141 Подраздел: Химия фуллеренов.

> Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно действующей интернет-конференции "Бутлеровские чтения". http://butlerov.com/readings/ Поступила в редакцию 22 ноября 2012 г. УДК 541.621.22:547.62.

Структура изомера 4169 (C_s) фуллерена C_{66} , не подчиняющегося правилу изолированных пентагонов, и причины его стабилизации в виде производных

© Хаматгалимов¹ Айрат Раисович и Коваленко^{1,2}** Валерий Игнатьевич

1 Отдел физико-химических исследований. Институт органической и физической химии им. А.Е. Арбузова. КазНЦ РАН. Ул. Ак. Арбузова, 8. г. Казань, 420088. Республика Татарстан. Россия. Тел.: (843) 273-22-83. E-mail: koval@iopc.ru

² Кафедра инженерной экологии. Казанский национальный исследовательский технологический университет. Ул. К. Маркса, 68. г. Казань, 420015. Республика Татарстан. Россия.

*Ведущий направление; *Поддерживающий переписку

Ключевые слова: фуллерен, правило изолированных пентагонов, локальные напряжения, экзоэдральные производные.

Аннотация

Проведен анализ структуры молекулы изомера 4169 (С_s) фуллерена С₆₆, не подчиняющегося правилу изолированных пентагонов, и впервые получены данные о распределении простых, двойных и делокализованных связей. Квантово-химические расчеты (DFT) показали, что этот изомер имеет закрытую электронную оболочку, а причиной его нестабильности являются локальные напряжения в гексагонах и пентагонах, прилежащих к линейной комбинации трех сопряженных пентагонов.