

Структура изомера 4169 (C_s) фуллерена C₆₆, 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 (C_s) фуллерена C₆₆, 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.