

Электронное и геометрическое строение ряда изомеров фуллерена C_{90} и структура их хлорных и перфторалкильных полиаддуктов

© Туктамышева¹ Регина Анваровна, Хаматгалимов² Айрат Раисович
и Коваленко^{*+1,2} Валерий Игнатьевич

¹ Кафедра инженерной экологии. Казанский национальный исследовательский технологический университет. Ул. К. Маркса, 68. Казань, 420015. Республика Татарстан.

Россия. Тел.: (843) 238-56-94. E-mail: koval@iorg.ru

² Институт органической и физической химии им. А.Е. Арбузова КазНЦ РАН.

Ул. Арбузова, 8. Казань, 420088. Республика Татарстан.

Россия. Тел.: (843) 273-93-65. E-mail: koval@iorg.ru

*Ведущий направление; +Поддерживающий переписку

Ключевые слова: фуллерен C_{90} , IPR изомеры, электронное строение, пирамидальность, радикальное присоединение, хлорные и перфторалкильные адденды, метод теории функционала плотности.

Аннотация

Впервые показано распределение электронной плотности в виде традиционной валентной схемы простых, двойных и делокализованных π -связей в молекулах IPR изомеров фуллерена C_{90} : $46(C_{2v})$, $35(C_s)$, $30(C_1)$, $28(C_2)$, $32(C_1)$, $34(C_s)$, которые являются предшественниками полиаддуктов $46(C_s)Cl_{32}$, $35(C_s)Cl_{24}$, $35(C_s)Cl_{28}$, $30(C_1)Cl_{22}$, $28(C_2)Cl_{26}$, $32(C_1)Cl_{24}$, $34(C_s)Cl_{32}$ и $32(C_1)(CF_3)_{12}$, $35(C_1)(CF_3)_{14}$, $30(C_1)(CF_3)_{18}$. Показано, что гексагоны с делокализованными π -связями являются наиболее вероятными позициями присоединения радикалов Cl и CF_3 , что отражает важную роль электронного строения фуллерена в реакции радикального присоединения.