

Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно действующей интернет-конференции “Бутлеровские чтения”. <http://butlerov.com/readings/>  
УДК 541:543.637.2:547.62:547.314.2. Поступила в редакцию 18 марта 2014 г.

## **Квантово-химическое моделирование реакции интеркалированной молекулы C<sub>2</sub>H<sub>2</sub> с C<sub>60</sub>**

© Трифонов<sup>+</sup> Николай Юрьевич и Шестаков\* Александр Фёдорович

*Лаборатория Комплексных катализаторов. Отдел кинетики и катализа. Институт проблем химической физики РАН. Проспект академика Семенова, 1. г. Черноголовка. Московская область. Ногинский район. Россия. Тел.: (49652) 2-17-63. E-mail: viktor-bilyaev@yandex.ru*

\*Ведущий направление; <sup>+</sup>Поддерживающий переписку

**Ключевые слова:** реакционная способность, фуллерен C<sub>60</sub>, ацетилен, октаэдрическая пора.

### **Аннотация**

Реакционная способность фуллерена C<sub>60</sub> была исследована методом DFT по отношению к ацетилену, интеркалированного в фуллерит. Образование нового химического соединения между C<sub>60</sub> и C<sub>2</sub>H<sub>2</sub> в октаэдрической поре фуллерита было предсказано. Спектральные свойства (ИК-спектр и химические сдвиги ЯМР <sup>13</sup>C и <sup>1</sup>H) этого соединения были рассчитаны.

### **Введение**

Процесс интеркаляции – это обратимое внедрение молекул или ионов в межслоевое пространство кристаллических веществ. При интеркаляции фуллерита малыми молекулами происходит заполнение октаэдрических пустот кристаллической решётки. Обычно на одну октаэдрическую пору приходится одна примесная молекула. Это создаёт предпосылки для селективного химического взаимодействия между этой молекулой и фуллереном. Так, фуллерит, интеркалированный ацетиленом, при нагревании вплоть до 300 °С не выделяет газообразный C<sub>2</sub>H<sub>2</sub> [1]. Это указывает на протекание химических реакций C<sub>2</sub>H<sub>2</sub> с фуллереном внутри поры.