

Полная исследовательская публикация Тематический раздел: Квантово-химические исследования.
Идентификатор ссылки на объект – ROl: jbc-01/15-41-2-130 Подраздел: Физико-химия фуллеренов.
Статья публикуется по материалам доклада на Международном научном
форуме “Бутлеровское наследие-2015”. <http://foundation.butlerov.com/bh-2015/>
УДК 539.193:539.194. Поступила в редакцию 29 марта 2015 г.

Строение и ИК спектры эндофуллеренов Me@C₆₀ (Me = Cu, Ag, Au, Sc, Y, La) по данным квантово-химических расчётов

© Мачнев Дмитрий Александрович, Нечаев⁺ Игорь Владимирович
и Введенский* Александр Викторович

Кафедра физической химии. Воронежский государственный университет. Университетская пл. 1.
г. Воронеж, 394006. Россия. Тел.: (473) 220-85-46. E-mail: nechaev_iv@chem.vsu.ru

*Ведущий направление; ⁺Поддерживающий переписку

Ключевые слова: эндофуллерены, ИК спектры, квантово-химическое моделирование.

Аннотация

Представлены результаты DFT-моделирования эндофуллеренов Me@C₆₀ металлов Ib- и IIIb- групп. Установлено, что металлы подгруппы меди располагаются в центре углеродного каркаса, не образуя химических связей с атомами углерода, тогда как металлы подгруппы скандия связаны с атомами шестичленного кольца, образуя структуру с симметрией C_s. При внедрении в C₆₀ атомов Cu, Ag и Au, ИК спектр эндофуллерена состоит из четырёх линий, также характерных для чистого C₆₀. Спектр эндофуллеренов металлов подгруппы скандия включает линии, запрещённые по симметрии для чистого фуллерена, что делает возможным их экспериментальное определение методом ИК спектроскопии в смеси с C₆₀.