

Квантово-химическое изучение строения и энергии образования изомерных структур $C_{60}N_2^q$ и $C_{60}N_2H^q$, $q = 0, -1, -2$, на основе фуллерена C_{60}

© Трифонов⁺ 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; ⁺Поддерживающий переписку

Ключевые слова: реакционная способность, катализ, фуллерен C_{60} , фиксация азота.

Аннотация

В данной работе были рассмотрены различные интермедиаты фиксации молекулярного азота в присутствии супрамолекулярного комплекса фуллерена C_{60} с γ -циклодекстрином в процессе электролиза. Были найдены структуры, у которых имеется относительно небольшое повышение энергии при присоединении N_2 .