

Полная исследовательская публикация Тематический раздел: Квантово-химические исследования.
Идентификатор ссылки на объект – ROI: jbc-01/17-49-1-28 Подраздел: Химия фуллеренов.
Цифровой идентификатор объекта – <https://doi.org/10.37952/ROI-jbc-01/17-49-1-28>
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно действующей интернет-конференции “*Бутлеровские чтения*”. <http://butlerov.com/readings/>
УДК 541.621.22:547.62. Поступила в редакцию 27 января 2017 г.

Строение молекул двух изомеров 234 (C_s) и 258 (C₁) высшего фуллерена C₁₀₄

© Митрошкина¹ Марина Вячеславовна, Хаматгалимов^{1,2} Айрат Раисович
и Коваленко^{1,2*+} Валерий Игнатьевич

¹ Кафедра инженерной экологии. Инженерный химико-технологический институт. Казанский национальный исследовательский технологический университет. ул. К. Маркса, 68. г. Казань, 420015. Республика Татарстан. Россия. Тел.: (843) 273-22-83. E-mail: m.mitroshkina@mail.ru

² Лаборатория физико-химического анализа. 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

*Ведущий направление; +Поддерживающий переписку

Ключевые слова: фуллерен C₁₀₄, правило изолированных пентагонов, структура молекул, квантово-химические расчеты.

Аннотация

Проведен анализ структуры молекул двух подчиняющихся правилу изолированных пентагонов изомеров 234 (C_s), а также и 258 (C₁) высшего фуллерена C₁₀₄. Впервые получены данные о распределении простых, двойных и делокализованных в гексагоне π-связей, кроме того представлены структурные формулы исследуемых молекул. Квантово-химические расчеты, проведенные в рамках теории функционала плотности (DFT), показали, что оба исследуемых изомера имеют закрытую электронную оболочку и подтвердили предварительно показанное распределение связей, полученное в результате применения разработанного нами эмпирического подхода. Показано, что, подобно ранее изученным высшим фуллеренам, в исследуемых изомерах наиболее короткими являются двойные связи между пентагонами. Обнаружено, что для большого фуллерена C₁₀₄, число гексагонов в котором достигает 42 при неизменном числе пентагонов, равно 12, имеет место отклонение некоторых длин связей от предсказанных. Это наблюдается в субструктурах, включающих в свой состав до 25-30 гексагонов. Приложение разработанного подхода к определению структуры молекул высших фуллеренов с числом атомов углерода более 90 в сочетании с квантово-химическими расчетами оказалось эффективным, учитывая зачастую невозможность получения подобной информации экспериментальными методами, и доказана его применимость к подобным фуллеренам. Выявленные признаки в структуре молекул высших фуллеренов позволяют прогнозировать возможность синтеза того или иного изомера высших фуллеренов до проведения экспериментальных работ. Сравнивая найденные нами особенности электронного строения молекул фуллеренов с экспериментальными данными, которые дают информацию о положении аддендов в молекулах их экзоэдральных производных, удается выявить наиболее вероятные положения, по которым пройдут разнообразные реакции присоединения. Практическим результатом работы является то, что выявленные структурные особенности молекул высших фуллеренов с определенной вероятностью открывают осознанные пути химической модификации молекул таких фуллеренов для получения важных производных на их основе для применения в различных сферах.