

## Структура и стабильность фуллерена C<sub>104</sub>: изомеры 812 (D<sub>2</sub>) и 822 (D<sub>3d</sub>), подчиняющиеся правилу изолированных пентагонов

© Гайнуллина<sup>1</sup> Алсу Ахтемовна, Хаматгалимов<sup>1,2</sup> Айрат Раисович  
и Коваленко<sup>1,2\*+</sup> Валерий Игнатьевич

<sup>1</sup> Кафедра инженерной экологии. Инженерный химико-технологический институт. Казанский национальный исследовательский технологический университет. ул. Карла Маркса, 68. г. Казань, 420015. Республика Татарстан. Россия. Тел.: (843) 273-22-83. E-mail: galsu93@mail.ru

<sup>2</sup> 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 C<sub>104</sub>, правило изолированных пентагонов, структура молекул, распределение связей, субструктуры, квантово-химические расчеты.

### Аннотация

Проведен анализ структуры молекул двух, подчиняющихся правилу изолированных пентагонов, изомеров 812 (D<sub>2</sub>) и 822 (D<sub>3d</sub>) высшего фуллерена C<sub>104</sub>. Впервые получены данные о распределении в исследуемых молекулах фуллеренов простых и двойных связей, а также π-связей, делокализованных в гексагонах, и представлены их структурные формулы вместо общепринятых молекулярных графов. Квантово-химические расчеты, проведенные в рамках теории функционала плотности (DFT), показали, что изомер 812 (D<sub>2</sub>) имеет закрытую электронную оболочку, в то время как изомер 822 (D<sub>3d</sub>) имеет две эквивалентные радикальные субструктуры, составленные из трех феналенильных фрагментов. Разница в энергиях молекул этих двух изомеров составляет около 25 ккал/моль в пользу изомера 812. Показано, что в структуре исходного (пустого) изомера 812 (D<sub>2</sub>), подобно ранее изученным фуллеренам, наиболее короткими являются двойные связи между пентагонами, что важно для понимания процессов синтеза производных фуллерена. Квантово-химические расчеты практически полностью подтвердили расстановку связей в обеих исследованных молекулах. Однако в связи с ростом размера молекулы фуллерена и, следовательно, числа гексагонов при неизменном, равном 12, числе пентагонов обнаружено отклонение от предсказанных некоторых длин связей в субструктурах, составленных значительным числом конденсированных гексагонов. Обнаруженные расхождения в значениях длин связей по сравнению с предсказанными объясняются их принадлежностью фрагментам исследованных здесь молекул, сходным с нанотрубками, в которых отсутствуют пентагоны. На основании ранее проведенного нами анализа распределения аддендов в ряду высших фуллеренов, вплоть до C<sub>90</sub>, который показал, что наиболее вероятными позициями в реакциях радикального присоединения являются гексагоны с делокализованными связями, можно ожидать, что аналогичная картина распределения будет иметь место и для экзоэдральных производных изомеров фуллерена C<sub>104</sub>. Важным практическим результатом работы является то, что выявленная структура молекул фуллеренов открывает осознанные пути химической модификации молекул фуллеренов для получения важных для практики производных.