

Полимерные формы радикальных фуллеренов $C_{74}(D_{3h})$ и $C_{76}(T_d)$

© Хаматгалимов^{1,2} Айрат Раисович и Коваленко^{1,3*+} Валерий Игнатьевич

¹ *Лаборатория физико-химического анализа. Институт органической и физической химии им. А.Е. Арбузова - обособленное структурное подразделение Федерального исследовательского центра КазНЦ РАН. ул. Ак. Арбузова, 8. Казань, 420088. Республика Татарстан. Россия.*

Тел.: (843) 273-22-83. E-mail: koval@iopc.ru

² *Кафедра катализа. Институт нефти, химии и нанотехнологии. Казанский национальный исследовательский технологический университет. ул. Карла Маркса, 68. г. Казань, 420015.*

Республика Татарстан. Россия.

³ *Кафедра инженерной экологии. Инженерный химико-технологический институт. Казанский национальный исследовательский технологический университет. ул. Карла Маркса, 68. г. Казань, 420015. Республика Татарстан. Россия.*

*Ведущий направление; +Поддерживающий переписку

Ключевые слова: фуллерен, радикал, полимер, структура молекул, субструктура, квантово-химические расчеты.

Аннотация

Работа посвящена теоретическому обоснованию экспериментально обнаруженных, но не объясненных фактов образования полимерных форм фуллеренов $C_{74}(D_{3h})$ и $C_{76}(T_d)$. Нами убедительно показано, что движущей силой образования в ходе электродугового синтеза фуллеренов линейных и циклического олигомеров $C_{74}(D_{3h})$ и $C_{76}(T_d)$ является радикальная природа этих фуллеренов. Выявлена общая закономерность распределения спиновых плотностей фуллеренов $C_{74}(D_{3h})$ и $C_{76}(T_d)$, имеющих соответственно две и четыре феноленил-радикальные субструктуры молекул. При переходе от димеров фуллерена $C_{74}(D_{3h})$ к цепочкам тримеров, тетрамеров и пентамеров, во всех случаях триплетные конфигурации остаются энергетически более выигрышными. Отмечено, что в олигомерах межфуллереновые углеродные связи слабые, что позволяет легко переходить от полимерных форм к индивидуальным молекулам радикальных $C_{74}(D_{3h})$ и $C_{76}(T_d)$. Можно ожидать, что в полимерном состоянии такие реакционноспособные фуллерены могут сохраняться определенное время и при необходимости легко переводиться в радикальные состояния либо их нагреванием, либо растворением в пиридине, анилине, и подобных растворителях. Таким образом, полученные нами результаты открывают неожиданные пути химической модификации радикальных фуллеренов и получения новых важных производных на их основе.