

Структура молекулы изомера 17894 (C₁) фуллерена C₇₆: причины её нестабильности и вероятные пути стабилизации

© Хаматгалимов¹ Айрат Раисович, Егорова² Анна Сергеевна
и Коваленко^{1,2*†} Валерий Игнатьевич

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

Тел.: (843) 273-22-83. E-mail: engecol88@list.ru

² 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 C₇₆, правило изолированных пентагонов, структура молекул, распределение связей, субструктуры, квантово-химические расчеты.

Аннотация

Известно, что фуллерены, которые не подчиняются правилу изолированных пентагонов, нестабильны и не могут быть синтезированы в чистом виде, однако некоторые из них удается получить как производные: эндодральные или экзодральные. На основе разработанного нами полумпирического подхода к моделированию молекулярной структуры фуллеренов проведен анализ строения молекулы изомера 17894 (C₁) фуллерена C₇₆, не подчиняющегося правилу изолированных пентагонов. Впервые представлены данные о распределении простых, двойных и делокализованных π-связей в исследуемом фуллерене и приведена его структурная формула, которые практически полностью подтвердились в результате последующих квантово-химических расчетов. Показано, что нестабильность этой молекулы вызвана как открытой электронной оболочкой, так и высоким локальным напряжением пенталенового фрагмента. Синтез эндодрального металлофуллерена сопровождается образованием ионной пары: аниона фуллерена и катиона металла внутри молекулы. Это ведет к закрытию электронной оболочки фуллереновой молекулы и снятию избыточного локального напряжения в ней. При получении экзодрального производного предложены наиболее вероятные позиции аддендов, присоединенных к фуллереновой оболочке. Оба метода, каждый по-своему, демонстрируют возможность стабилизации молекулы изомера 17894 фуллерена C₇₆.

Выявление и анализ особенностей в строении молекул фуллеренов, не удовлетворяющих правилу изолированных пентагонов, совместно с данными о распределении спиновой и электронной плотности, может оказаться полезным для предсказания возможности их синтеза в виде производных и оценке их реакционной способности. Фундаментальное знание свойств нанообъектов, а именно фуллеренов, фактически развивается как самостоятельное направление с долгосрочной перспективой.