

СТРУКТУРА ИЗОМЕРОВ ВЫСШЕГО ФУЛЛЕРЕНА C₇₆: ПРИЧИНЫ ИХ СТАБИЛЬНОСТИ И НЕСТАБИЛЬНОСТИ

А. Р. Хаматгалимов, В. И. Коваленко

Институт органической и физической химии им. А.Е.Арбузова КазНЦ РАН

Характерной ситуацией на настоящий момент является то, что многие высшие фуллерены являются нестабильными и не могут быть получены. Причины нестабильности высших фуллеренов в виде "пустых" молекул и их стабилизации в виде эндоэдральных металлофуллеренов и производных пока не объяснены. Нами развивается новый подход анализа распределения связей в фуллеренах, при котором идентифицируется ряд субструктур, входящих в фуллереновую оболочку с характерными электронными особенностями.

Из двух возможных изомеров фуллерена C₇₆ выделен только один 1 (D₂), который был также получен в виде различных эндоэдральных металлофуллеренов и экзоэдральных трифторметильных производных. Ранее проведенные квантово-химические расчеты показали, что он является наиболее энергетически выгодным.

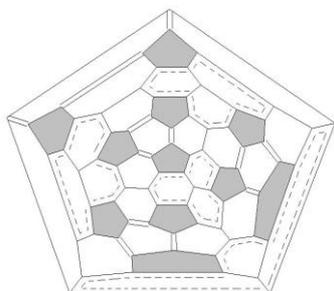


Рис.1. Диаграмма Шлегеля изомера 2 (T_d)

Для выяснения причины нестабильности второго изомера T_d был проведен анализ распределения связей с последующими квантово-химическими DFT расчетами (B3LYP), которые показали, что в структуре этого изомера содержатся четыре феналенил-радикальные субструктуры (рис. 1). Проведенные неограниченные по

спину квантово-химические расчеты триплетной конфигурации этого изомера подтвердили открытый характер его электронной оболочки. Поскольку нестабильность фуллеренов, кроме наличия неспаренных электронов, может быть обусловлена также напряженностью молекулы, был проведен анализ геометрических параметров обоих изомеров, который показал, что нестабильность изомера 2 (T_d) определяется лишь его радикальной природой, а не связана с локальными напряжениями молекулы. Развиваемый подход анализа структур фуллеренов позволяет не только объяснить причины их стабильности/нестабильности, но и предлагать пути стабилизации.