

**В.И. Коваленко, А.Р. Хаматгалимов**

**Строение  
и стабильность высших  
фуллеренов**

Москва  
2019

Издание не подлежит продаже

**Ответственный редактор**  
*доктор химических наук В.И. Коваленко*

- С83 **Коваленко В.И., Хаматгалимов А.Р.** Структура и стабильность высших фуллеренов / В.И. Коваленко, А.Р. Хаматгалимов; Ин-т органической и физической химии им. А.Е. Арбузова – обособленное структурное подразделение Федерального государственного бюджетного учреждения науки «Федеральный исследовательский центр «Казанский научный центр Российской академии наук». – М.: 2019. – 212 с.

ISBN 978-5-907036-31-4

Монография посвящена изучению природы стабильности высших фуллеренов, раскрытию связи между особенностями строения молекул высших фуллеренов и возможностью их получения. Предложен новый подход к моделированию структуры и стабильности высших фуллеренов, в основе которого лежит детальный анализ основных особенностей строения молекул фуллеренов. Разработанный подход совместно с учетом стабильности составляющих молекулу фуллерена субструктур является пионерским, способствующим более глубокому пониманию особенностей электронного строения фуллеренов.

Монография может быть использована в различных научных коллективах, занимающихся химией фуллеренов и их производных, специалистами в области физической химии наноструктурных объектов, а также в качестве учебного пособия для студентов и аспирантов, изучающих физико-химические основы нанообъектов.

© Коваленко В.И., Хаматгалимов А.Р., 2019  
© Институт органической и физической химии  
им. А.Е. Арбузова – обособленное структурное  
подразделение Федерального государственного  
бюджетного учреждения науки «Федеральный  
исследовательский центр «Казанский научный  
центр Российской академии наук», 2019

# ОГЛАВЛЕНИЕ

ВВЕДЕНИЕ . . . . .	5
<b>ГЛАВА 1. СОВРЕМЕННЫЕ ПРЕДСТАВЛЕНИЯ О СТРУКТУРЕ ФУЛЛЕРЕНОВ . . . . .</b>	<b>9</b>
1.1. Строение фуллеренов и правило изолированных пентагонов . . . . .	10
1.2. Особенности геометрической и электронной структур фуллеренов . . . . .	13
1.3. Ароматичность фуллеренов . . . . .	17
1.4. Производные фуллеренов. . . . .	21
1.4.1. Эндоздральные фуллерены. . . . .	21
1.4.2. Экзоздральные фуллерены . . . . .	24
1.5. Критерии стабильности фуллеренов. . . . .	27
<b>ГЛАВА 2. НОВЫЙ ПОДХОД К МОДЕЛИРОВАНИЮ СТРУКТУРЫ И СТАБИЛЬНОСТИ ВЫСШИХ ФУЛЛЕРЕНОВ . . . . .</b>	<b>38</b>
2.1. Основные принципы нового подхода к моделированию структуры и стабильности высших фуллеренов . . . . .	38
2.2. Методические особенности квантово-химических исследований электронного строения и стабильности высших фуллеренов. . . . .	49
<b>ГЛАВА 3. СТРУКТУРА И СТАБИЛЬНОСТЬ ВЫСШИХ ФУЛЛЕРЕНОВ. . . . .</b>	<b>59</b>
3.1. Структуры и результаты квантово-химических расчетов для изомеров, подчиняющихся правилу изолированных пентагонов, в ряду высших фуллеренов $C_{60}$ - $C_{86}$ . . . . .	61
3.1.1. Фуллерены $C_{60}$ и $C_{70}$ – наиболее стабильные фуллерены. . . . .	61
Эндоздральные фуллерены $C_{60}$ и $C_{70}$ . . . . .	62
3.1.2. Фуллерены $C_{72}$ и $C_{74}$ - характерные представители двух типов нестабильности фуллеренов. . . . .	63
Фуллерен $C_{72}$ . . . . .	65
Эндоздральные фуллерены $C_{72}$ . . . . .	68
Фуллерен $C_{74}$ . . . . .	69
Эндоздральные фуллерены $C_{74}$ . . . . .	72
Экзоздральные фуллерены $C_{74}$ . . . . .	73
3.1.3. Фуллерен $C_{76}$ . . . . .	74
Эндоздральные фуллерены $C_{76}$ . . . . .	77
Экзоздральные фуллерены $C_{76}$ . . . . .	77
3.1.4. Фуллерен $C_{78}$ . . . . .	78
Эндоздральные фуллерены $C_{78}$ . . . . .	82
Экзоздральные фуллерены $C_{78}$ . . . . .	84
3.1.5. Фуллерен $C_{80}$ . . . . .	85
Эндоздральные фуллерены $C_{80}$ . . . . .	89
Экзоздральные фуллерены $C_{80}$ . . . . .	90
3.1.6. Фуллерен $C_{82}$ . . . . .	91
Эндоздральные фуллерены $C_{82}$ . . . . .	96
Экзоздральные фуллерены $C_{82}$ . . . . .	99
3.1.7. Фуллерен $C_{84}$ . . . . .	100
Эндоздральные фуллерены $C_{84}$ . . . . .	108
Экзоздральные фуллерены $C_{84}$ . . . . .	111
3.1.8. Фуллерен $C_{86}$ . . . . .	114
Эндоздральные фуллерены $C_{86}$ . . . . .	119
Экзоздральные фуллерены $C_{86}$ . . . . .	119
3.2. Обобщенный прогноз возможности получения высших фуллеренов. . . . .	120

3.3. Стабилизация высших фуллеренов с открытой электронной оболочкой и предсказание их региоселективности в реакциях радикального присоединения . . . . .	127
<b>ГЛАВА 4. СТРУКТУРА ФУЛЛЕРЕНОВ, НЕ ПОДЧИНЯЮЩИХСЯ ПРАВИЛУ ИЗОЛИРОВАННЫХ ПЕНТАГОНОВ . . . . .</b>	<b>151</b>
4.1. Структура изомера 4348 ( $C_{2v}$ ), не подчиняющегося правилу изолированных пентагонов, фуллерена $C_{66}$ и эндоздрального металлофуллерена $Sc_2@C_{66}$ . . . . .	156
4.2. Структура цепочки трех пентагонов в изомере 4169 ( $C_6$ ) фуллерена $C_{66}$ , не подчиняющегося правилу изолированных пентагонов . . . . .	160
4.3. Структура изомеров 6140 ( $D_3$ ) и 6275 ( $D_3$ ), не подчиняющихся правилу изолированных пентагонов, фуллерена $C_{68}$ и эндоздрального металлофуллерена $Sc_3N@C_{68}$ . . . . .	163
4.4. Структура изомеров 22010 ( $C_2$ ) и 24095 ( $C_1$ ), не подчиняющихся правилу изолированных пентагонов, фуллерена $C_{78}$ . . . . .	167
<b>5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ . . . . .</b>	<b>176</b>
<b>6. ПРИЛОЖЕНИЕ. Атлас фуллеренов <math>C_{72}</math>-<math>C_{86}</math>, подчиняющихся правилу изолированных пентагонов . . . . .</b>	<b>178</b>