

**СТРОЕНИЕ МОЛЕКУЛ ДВУХ ИЗОМЕРОВ 822(D_{3d}) И 812(D₂)
ВЫСШЕГО ФУЛЛЕРЕНА C₁₀₄¹**

Коваленко В.И.^{1,2}, Хаматгалимов А.Р.¹,
Гайнуллина А.А.², Митрошкина М.В.²

¹Институт органической и физической химии им. А.Е. Арбузова КазНЦ РАН,
420088 Казань, ул. академика Арбузова, 8, koval@iopc.ru

²КНИТУ

Из 823 подчиняющихся правилу изолированных пентагонов изомеров фуллерена C₁₀₄, выделены и охарактеризованы методом РСА четыре производных: C₁₀₄(812)Cl₂₄, C₁₀₄(258)Cl₁₆ и C₁₀₄(234)Cl_{16\18\20\22} и Sm₂@C₁₀₄(822) [1]. Нами ранее был разработан эмпирический подход моделирования структуры молекул фуллеренов с априорным определением молекулярной формулы и последующими квантово-химическими расчетами, успешно апробированный на серии фуллеренов в ряду C₇₂-C₈₆ [2]. Представляло интерес оценить его возможности на примере самого большого из охарактеризованных высших фуллеренов и оценить вариации обнаруженных ранее закономерностей при увеличении размера фуллеренового каркаса. В данной работе показано, что изомер 812 является нейтральной молекулой, тогда как изомер 822 представляет собой бирадикал. Подобно ранее исследованным нами экзоэдральным производным высших фуллеренов адденды в молекуле C₁₀₄(812)Cl₂₄ занимают все гексагоны с делокализованными π-связями, тогда как эндоэдральные катионы самария располагаются вблизи атомов углерода с максимальной спиновой плотностью в молекуле Sm₂@C₁₀₄(822), что также совпадает с нашими данными для высших фуллеренов ряда C₇₂-C₈₆.

1. S. Yang, S. Wang, S.I. Troyanov. The Most Stable Isomers of Giant Fullerenes C₁₀₂ and C₁₀₄ Captured as Chlorides, C₁₀₂(603)Cl_{18/20} and C₁₀₄(234)Cl_{16/18/20/22}. *Chem. Eur. J.* 2014, **20**, 6875-6878 (and references in it).

2. A.R. Khamatgalimov, V.I. Kovalenko. Molecular structures of unstable isolated-pentagon-rule fullerenes. *Russ.Chem.Rev.*, 2016, **85**, in press DOI: [10.1070/RCR4571](https://doi.org/10.1070/RCR4571)

¹ Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, проект № 16-03-00992а