

S-ИНДАЦЕНОВАЯ СУБСТРУКТУРА В МОЛЕКУЛАХ ФУЛЛЕРЕНОВ

Коваленко В.И., Хаматгалимов А.Р., Гафиатуллина А.Р.

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

420088 Казань, ул. Арбузова, 8, koval@iopc.ru ;

Гексагоны s-индаценовой субструктуры (H_d) характеризуются делокализацией π -связей (схема). Эти гексагоны существенно влияют на структурные особенности и реакционную способность фуллеренов. Показано, что H_d гексагоны имеют своеобразную реакционную способность в реакциях цикло- и радикального присоединения [1]. В данной работе нами впервые показана роль H_d субструктуры, определяющая химические сдвиги гелия-3 в спектрах ^3He ЯМР эндоэдральных фуллеренов $^3\text{He}@C_n$, [2]. Именно она сильно экранирует сигнал атома гелия. Показано, почему химические сдвиги $^3\text{He}@C_n$ высших фуллеренов располагаются между химическими сдвигами $^3\text{He}@C_{60}$ (-6.4 м.д.) и $^3\text{He}@C_{70}$ (-28.8 м.д.) фуллеренов C_{60} и C_{70} . Ранее не идентифицированный высокопольный химический сдвиг 24.4 м.д., впервые отнесен к сигналу изомера 24 фуллерена C_{84} , имеющего молекулярное строение, сходное с фуллереном C_{70} . Молекулы этих двух фуллеренов содержат соответственно 6 и 5 гексагонов H_d , образующих экваториальный пояс молекулы, что обуславливает весьма значительное экранирование ЯМР сигнала атома гелия, находящегося внутри молекулы.

1. Kovalenko V.I., Semyashova M.V. Chem. Comput. Simulation. Butlerov Commun. - 2000. – №. 3. – P. 41-43.
2. Kovalenko V.I., Tuktamysheva R.A., Khamatgalimov A.R. Russ. J. Phys.Chem. A, - 2014, - Vol. 88, P. 103–107.
3. Saunders M., Jiménez-Vázquez H.A., Cross R.J., Mroczkowski S., Freedberg D.I., Anet F.A.L. Nature, - 1994. - Vol. 367. - P. 256-258.
4. Saunders M., Jiménez-Vázquez H.A., Cross R.J., Billups W.E., Gesenberg C., Gonzalez A., Luo W., Haddon R.C., Diederich F., Herrmand A. J. Am. Chem. Soc. – 1995. – Vol. 117. – P. 9305-9308.