

УДК 544.18

ГЕОМЕТРИЧЕСКИЕ ПАРАМЕТРЫ ИСХОДНЫХ ИЗОМЕРОВ МОЛЕКУЛЫ C₉₀

Туктамышева Р.А.^а, Хаматгалимов А.Р.^б, Коваленко В.И.^б

^а*Казанский авиационно-технический колледж им. П.В Дементьева
420036, г. Казань, ул. Копылова, д. 26*

^б*Институт органической и физической химии им. А.Е. Арбузова ФИЦ КазНЦ РАН
420088, г. Казань, ул. Ак. Арбузова, д. 8
e-mail: regina_88_86@mail.ru, koval@iopc.ru*

Очевидным фактором, определяющим селективность и последовательность радикального присоединения, является распределение электронной плотности фуллеренового каркаса. Пирамидальность рассматривается нами как «выход» углеродного атома из плоскости. Так, в графите и графене все атомы углерода лежат в плоскости и каждый из них лежит в узле трех гексагонов, каждый гексагон имеет валентный угол 120° и, соответственно, сумма валентных углов при данном атоме равна 360°. Молекула фуллерена имеет сферический каркас. Так, в фуллерене C₆₀ сумма валентных углов любого атома углерода равна 348°, что указывает на отклонение от плоскости на 12°. Поскольку фуллерен C₆₀ является самым стабильным, это отклонение принимается за норму. Если же сумма валентных углов существенно ниже (пирамидальность выше), то полагают, что данный атом углерода может быть более реакционноспособным, чем атомы с более низкой пирамидальностью.

Нами были проанализированы геометрические параметры – длины связей и суммы валентных углов при атомах углерода в молекулах следующих изомеров: 46(C_{2v}), 35(C_s), 30(C₁), 28(C₂), 32(C₁) и 34(C_s). Получены максимальные, минимальные значения суммы валентных углов углеродных атомов, а также интервал, по которому происходило присоединение аддендов, соответствующий экспериментальным данным. Таким образом, нами впервые показано, что наиболее важным параметром, влияющим на картину расположения аддендов в реакции радикального присоединения к фуллерену C₉₀, является электронная структура молекул исходного фуллерена.