

Атлас фуллеренов - исследование 1812 изомеров фуллерена C₆₀*Герасимов В.И.¹, Суясова М.В.²**viger53@rambler.ru*¹ Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого² Петербургский институт ядерной физики им.Б.П.Константинова, НИЦ "Курчатовский институт", Ленинградская область, Гатчина

Фуллерены новая аллотропная форма углерода открытая в 1985 году группой исследователей Крото Г., Смолли Р.Е. и Керл Р.Ф. История этого открытия изложена в нобелевских лекциях авторов [1]. Форма фуллеренов - объемная молекула овальной формы, грани которой образуют шести- и пятиугольники. Наиболее известный фуллерен C₆₀ имеет 20 шестиугольников и 12 пятиугольников. Авторы открытия утверждали, что фуллерен C₆₀ имеет форму усеченного икосаэдра у которого все 12 пятиугольников изолированы друг от друга. Для обоснования такого утверждения было введено правило IPR - правило изолированных пятиугольников и критерий минимальной энергии молекулы. В 1995 году был издан Атлас фуллеренов [2]. В данном атласе утверждается, что у фуллерена C₆₀ возможны 1812 изомеров, но в силу принятого правила IPR и критерия минимальной энергии существует только один с изолированными пятиугольниками. В подавляющем большинстве публикаций эти критерии являются основными для обоснования модели фуллерена C₆₀ с изолированными пятиугольниками, например [3].

Конфигурация изомеров отличается друг от друга группировками пятиугольников. Эти группировки позволяют распределить изомеры C₆₀ по комбинаторным рядам. В результате проведенных исследований установлены конфигурации изомеров вероятность образования которых превышает вероятность формирования C₆₀ с изолированными пятиугольниками более чем в 100 раз. Эти изомеры имеют контактные пентагоны. Кроме этого выявлена закономерность: чем больше одиночных пятиугольников, тем сложнее собрать объемную молекулу, а во многих случаях собрать замкнутую объемную модель невозможно. Проведенные расчеты энергии изомеров показали, что среднее значение энергии составляет 1 435 577 ккал/моль, а среднеквадратичное отклонение 190 ккал/моль для всех 1812 изомеров. Из полученных данных следует, что разница энергий для всех изомеров атласа составляет +/- 0,013%. При такой разнице можно сделать вывод - все изомеры имеют одинаковую энергию.

Проведенные исследования позволяют сделать следующие выводы: правило IPR не обосновано, критерий минимума энергии для обоснования существования фуллерена с изолированными не корректен. Наиболее вероятный синтезируемый фуллерен C₆₀ имеет контактные пятиугольники определенной конфигурации.

Ссылки

1. Смолли Р.Е. // УФН. 1998. Т.168. С.323; Керл Р.Ф. // Там же. С.331; Крото Г. // Там же. С.343
2. Fowler P.W., Manolopoulos D.E. An Atlas of Fullerenes, Dover Publications, Inc. Mineola, New York
3. Sure R., Hansen A., Schwerdtfeger P., Grimme S. // Physical Chemistry Chemical Physics. 2017. Т.19 С.22