

Поляризуемость олигомеров и квазиодномерных полимеров фуллерена C_{70}

Гарифуллин А.И.¹

st109284@student.spbu.ru

¹ СПбГУ, Санкт-Петербург, Россия

Молекула C_{70} обладает точечной симметрией D_{5h} . Меньшее количество операций симметрии, по сравнению с C_{60} , приводит к большому количеству гипотетических полимерных структур. Из нескольких возможных способов построения олигомеров и полимеров нами был использован способ присоединения по связям ab полюса молекулы C_{70} , так как эти связи наиболее реакционноспособны и ведут к наиболее устойчивым структурам [1]. Так, посредством симметричного анализа было получено пять типов олигомеров, а также соответствующих им полимеров C_{70} , различающихся относительным положением связей ab . При соединении ab_1ab_1' (аналогичному в единственном синтезированном фуллерите C_{70} [2]) получена квазиодномерная структура, обладающая стержневой симметрией $pcmm$. Соединение фуллереновых ядер можно сопровождать кручением. Так, варьируя величину угла кручения, можно получить два других типа соединения, обозначаемых ab_1ab_2' и ab_1ab_3' . В зависимости от направления угла, в них выделяют два подтипа: в случае, если оно происходит последовательно в одном направлении, формируются винтовые структуры, называемые *helix*; если же каждое последовательное кручение происходит в противоположном направлении, могут быть построены зигзагообразные структуры — *zz*. Зиг-заг полимеры типа $ab_1ab_2'(zz)$ и $ab_1ab_3'(zz)$ обладают симметрией, задаваемой стержневой группой $p2/c11$. Симметрия винтовых полимеров типа $ab_1ab_2'(helix)$ и $ab_1ab_3'(helix)$ задается винтовыми группами симметрии $L10_122$ и $L10_122$, относящимися к пятому семейству винтовых групп симметрии.

Квантово-химические расчеты полимеров и олигомеров фуллеренов C_{70} были выполнены с помощью программы CRYSTAL17 [3]. Был использован обменно-корреляционный функционал с учетом дисперсионной поправки PBE-D3 и атомный базис *rob-TZVP*. Тензор поляризуемости был рассчитан методом CPHF/KS [4].

В нашей работе установлено, что с увеличением числа молекул C_{70} в олигомерах ряд их параметров сходится к предельным значениям, рассчитанным для полимерных моделей. Разница поляризуемостей ближайших представителей ряда сходится к удельной (на одно ядро C_{70}) поляризуемости полимера, а разница энергий ВЗМО-НСМО к соответствующему значению энергетической щели. Эти же результаты были получены ранее для олигомеров C_{60} [5].

Ссылки

1. D.Sh. Sabirov, S.L. Khursan, R.G. Bulgakov, 1,3-Dipolar addition reactions to fullerenes: the role of the local curvature of carbon surface, *Russ. Chem. Bull.* (2008), **57**, 2520
2. A.V. Soldatov, G. Roth, A. Dzyabchenko, D. Johnels, S. Lebedkin, C. Meingast, B. Sundqvist, M. Haluska, H. Kuzmany. *Science* (2001), **293**, 680
3. R.A. Dovesi, V.R. Saunders, C. Roetti, R. Orlando, C.M. Zicovich-Wilson, F. Pascale, B. Civalieri, K. Doll, N.M. Harrison, I.J. Bush, P.D'Arco, M. Llunell, M. Caus'а, Y. Noël, L. Maschio, A. Erba, M. Rerat, S. Casassa, CRYSTAL17 User's Manual (University of Turin, Torino, Italy, 2018).
4. M.Ferrero, M.Rérat, R.Orlando, R.Dovesi. *J. Comput. Chem.* (2008), **29**, 1450.
5. D.Sh.Sabirov, V.V.Porsev, A.A.Tukhbatullina, R.A.Evarestov. *Fullerenes, Nanotubes and Carbon Nanostructures* (2025), **33**, 103.