стабилизирует транс-конформер А, вероятно, за счет изменения конфигурации молекулярных орбиталей из-за электронных взаимодействий с остовом нанотрубки.

1. Osamura Y., Schaefer H.F. Internal rotation barrier and transition state for glyoxal // Journal of Chemical Physics. 1981. V. 74. № 8. P. 4576-4580.
2. Кузнецов В.В. Конформационные свойства этана и его аналогов в нано-трубках // Российский химический журнал. 2017. Т. Т. 61. № 1. С.37-47.
3. Laikov D.N., Ustynyuk Yu.A. PRIRODA-04: a quantum-chemical program suite. New possibilities in the study of molecular systems with the application of parallel computing// Russian Chemical Bulletin. 2005. V. 54. № 3. P. 820-826.

Бочкор С.А., Кузнецов В.В.

Ацетилен в фуллерене C₆₀: пример взаимодействие силового поля наноструктуры с тройной углерод-углеродной связью

*Уфимский государственный нефтяной технический университет
Уфимский государственный авиационный технический университет
(Россия, Уфа)*

doi:10.18411/spc-16-01-2018-08

idsp: 000001:spc-16-01-2018-08

Аннотация

В рамках расчетного DFT-приближения PBE/3 ζ на примере эндокомплекса ацетилена с фуллереном C₆₀, показано, что силовое поле нанобъекта меняет электронные и энергетические характеристики гостевой молекулы, в частности, понижает порядок тройной углерод-углеродной связи и сокращает ее длину.

Ключевые слова: ацетилен, фуллерен, порядок тройной связи, компьютерное моделирование.

Abstract

In the frame of computational DFT approximation PBE/3 ζ using endocomplex of acetylene with fullerene C₆₀ as an example it has been shown that the force field of nanoobject changes the electronic and structural parameters of guest molecule, in particular, decreases the order of triple carbon-carbon bond and cuts its length.

Keywords: acetylene, fullerene, order of triple bond, computer simulation.

Влияние силового поля фуллеренов на структурные и конформационные характеристики инкапсулированных молекул наглядно демонстрируется примером заметного возрастания барьера внутреннего вращения, а также сокращения длин всех связей молекулы этана в фуллерене C₆₀[1]. В этом отношении представляет значительный интерес исследование эндокомплексов фуллеренов с гостевыми молекулами, содержащими кратные связями. Целью настоящей работы является изучение влияния фуллерена C₆₀ на структурные изменения инкапсулированной молекулы ацетилена с помощью DFT-расчетного приближения PBE/3 ζ (программный комплекс ПРИРОДА [2]).

Полученные результаты свидетельствуют о заметных различиях в структурных и энергетических характеристиках молекул свободного (рис. 1) и заключенного в полость фуллерена (рис. 2) ацетилена.

Как и в других случаях [1] силовое поле фуллерена «сжимает» инкапсулированную молекулу, приводя к заметному сокращению длин связей. Помимо этого, существенно уменьшается порядок тройной связи по Малликену и значения отрицательных зарядов на атомах углерода. Положительный заряд на водородных атомах, наоборот, возрастает. В результате молекула ацетилена в полости фуллерена

приобретает результирующий положительный заряд (0.32), хотя в целом система $C_2H_2@C_{60}$ остается электрически нейтральной. Данное явление наблюдается для всех ранее исследованных эндокомплексов малых молекул с фуллеренами [1] и нанотрубками [3], свидетельствуя о заметном переносе заряда с гостевой молекулы на остов наноструктуры.

Рис. 1. Параметры свободной молекулы C_2H_2

Рис. 2. Параметры молекулы C_2H_2 в эндокомплексе

Таким образом, молекула ацетилена в модельном фуллерене в результате структурной перестройки приобретает новые свойства, которые можно использовать для осуществления разнообразных химических реакций в полости наноструктуры с целью синтеза новых практически полезных материалов.

1. Кузнецов В.В. Теоретическая оценка конформационной предпочтительности молекулы этана в фуллерене C_{60} // Журнал общей химии – 2013. Т.83. № 6. С.1033-1034.
2. Laikov D.N., Ustynyuk Yu.A. PRIRODA-04: a quantum-chemical program suite. New possibilities in the study of molecular systems with the application of parallel computing // Russian Chemical Bulletin. 2005. V. 54. № 3. P. 820-826.
3. Кузнецов В.В. Конформационные свойства этана и его аналогов в нанотрубках // Российский химический журнал. 2017. Т. 61. № 1. С.37-47.