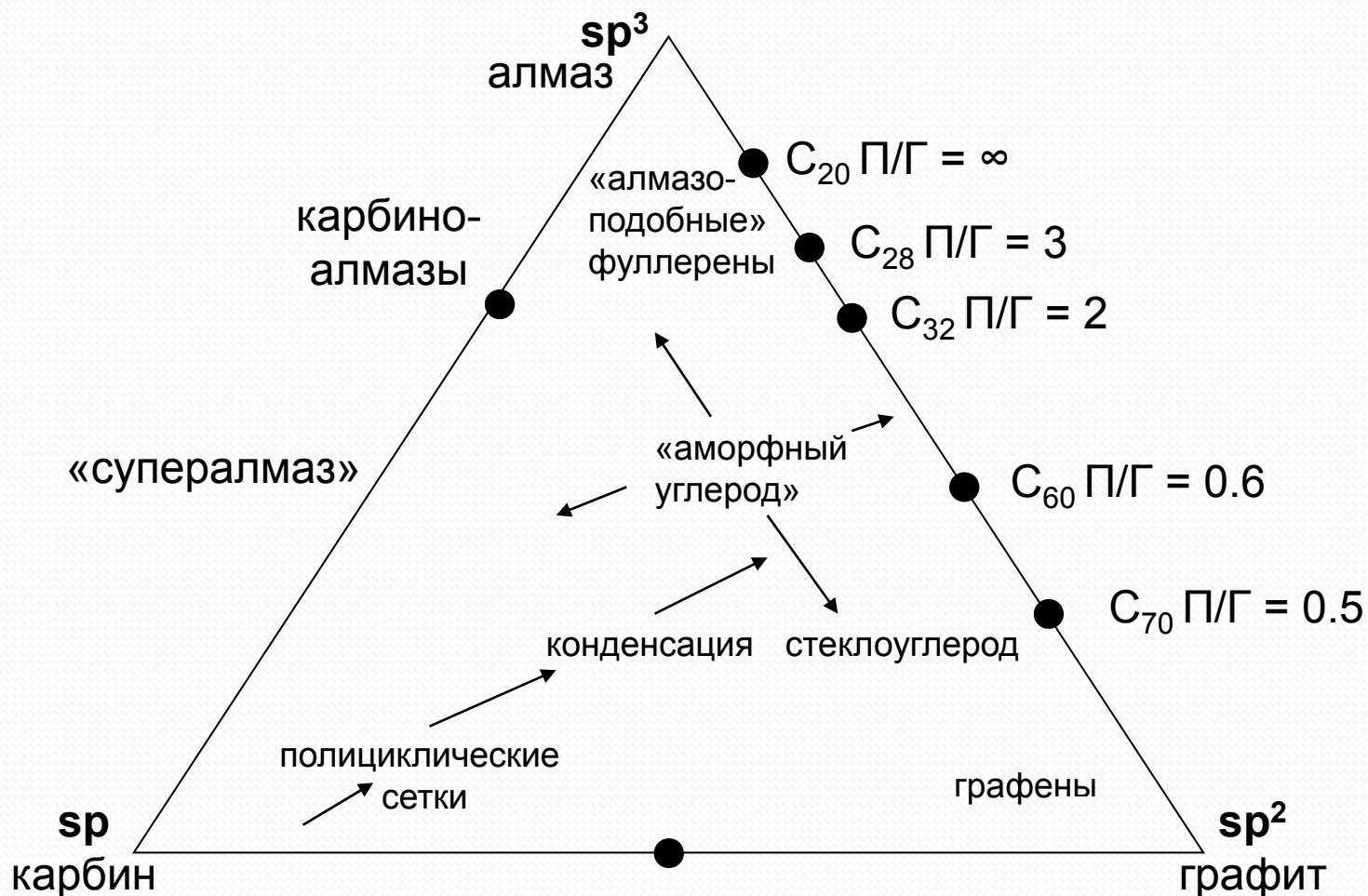


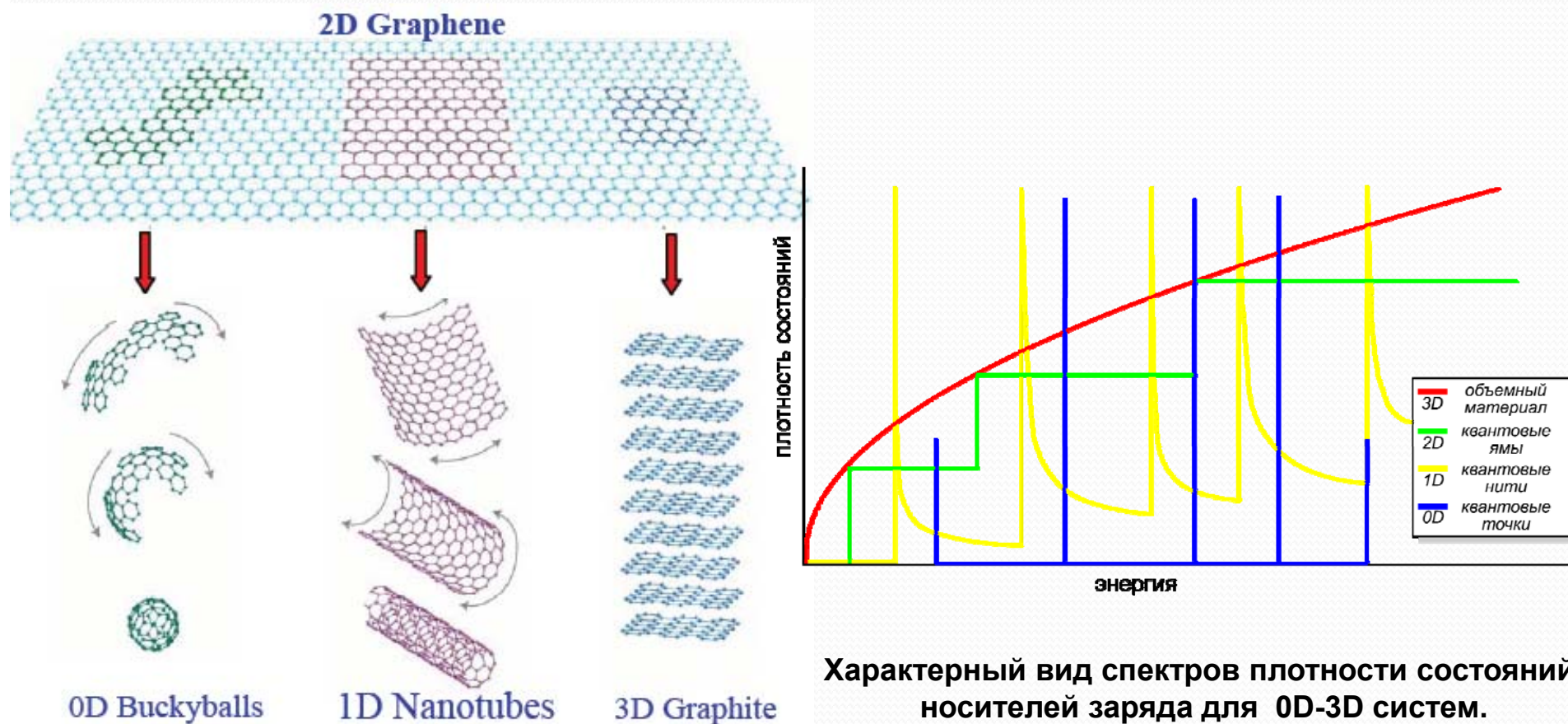
Молекулярные системы

Углерод: многообразие его аллотропных форм.
Фуллерены и их производные.

Классификация аллотропных форм углерода



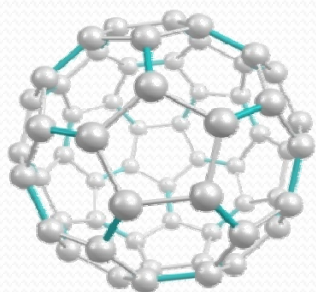
Многообразие форм углерода



Многообразие форм существования углерода

Почему углерод?

Quantum **D**ot (**0D**)



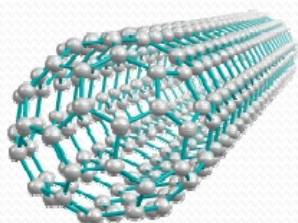
C_{60} , C_{70} , C_{2n+2} ($2n > 70$)

Селективность

Особенности физических свойств

Возможность химической
модернизации

Quantum **W**ire (**1D**)

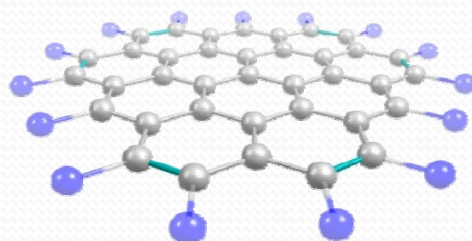


SWCNTs(n,m) and **MWCNT**s

Металлы и полупроводники

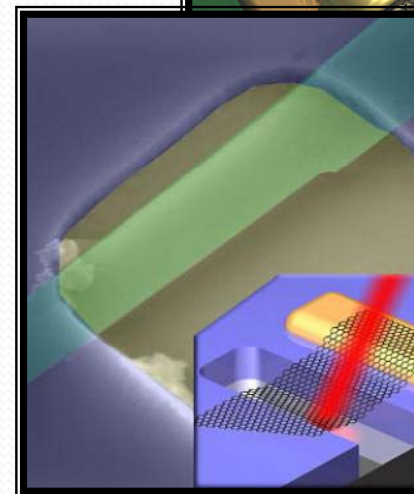
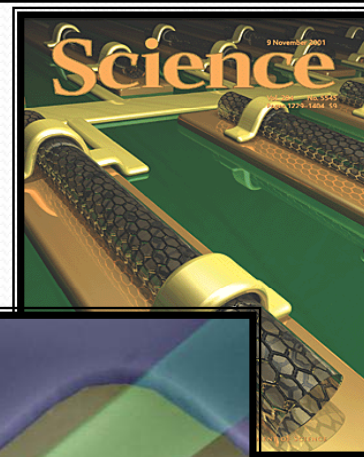
Различная подвижность
основных носителей заряда

Quantum **W**ell (**2D**)

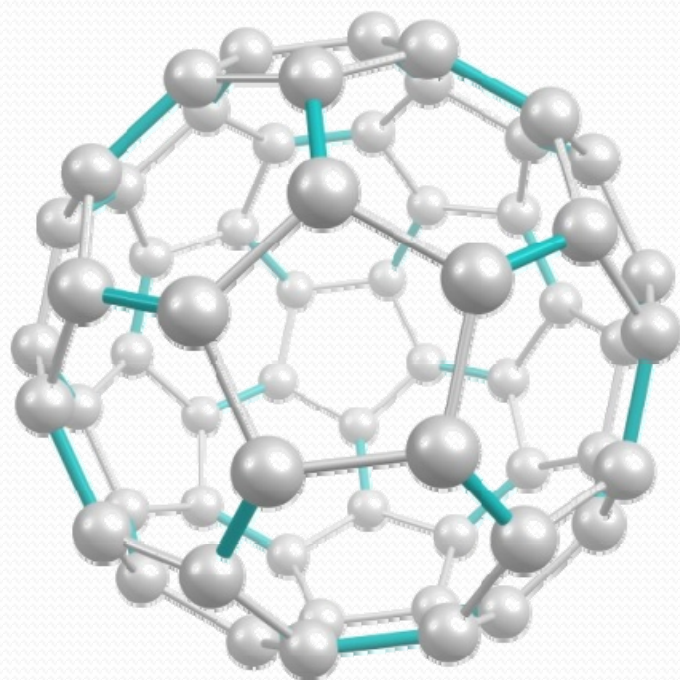


Graphene

Область ждущая
своих открытий



Простейший фуллерен: C_{60}



3D модель

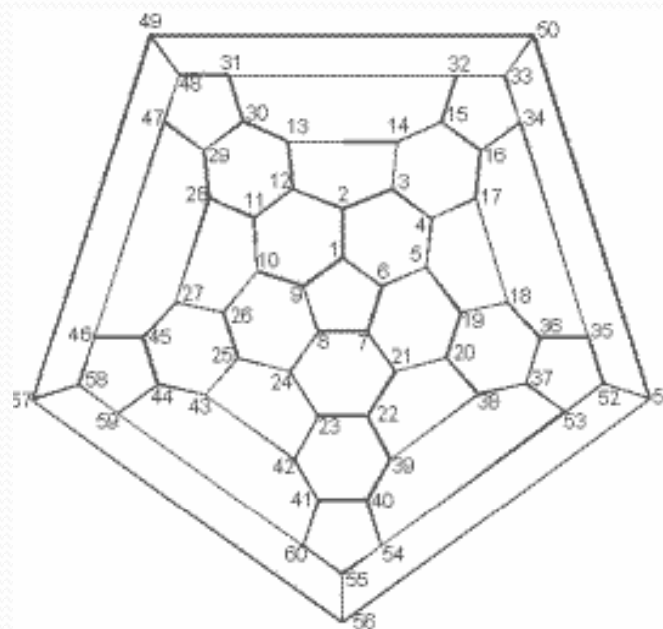
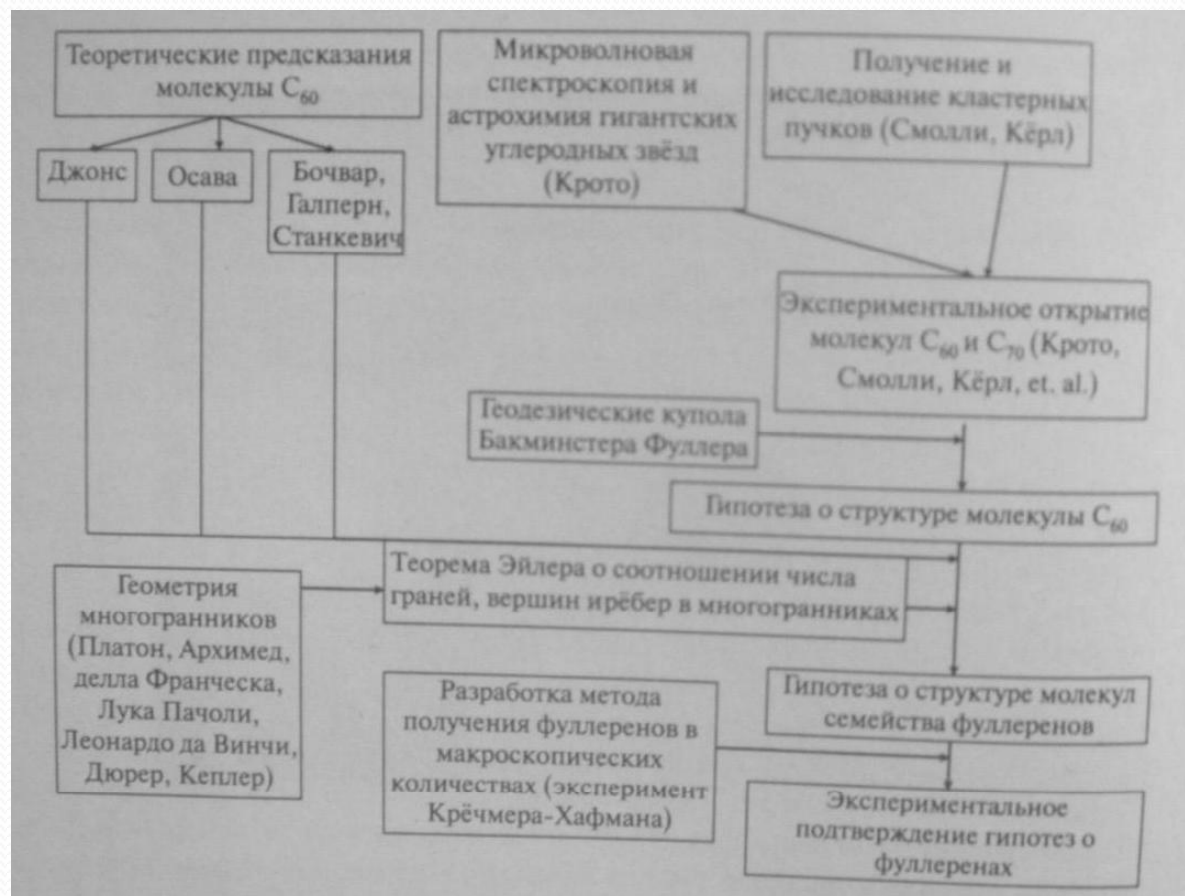


Диаграмма
Шлегеля

«Генеалогическое дерево» открытия фуллеренов



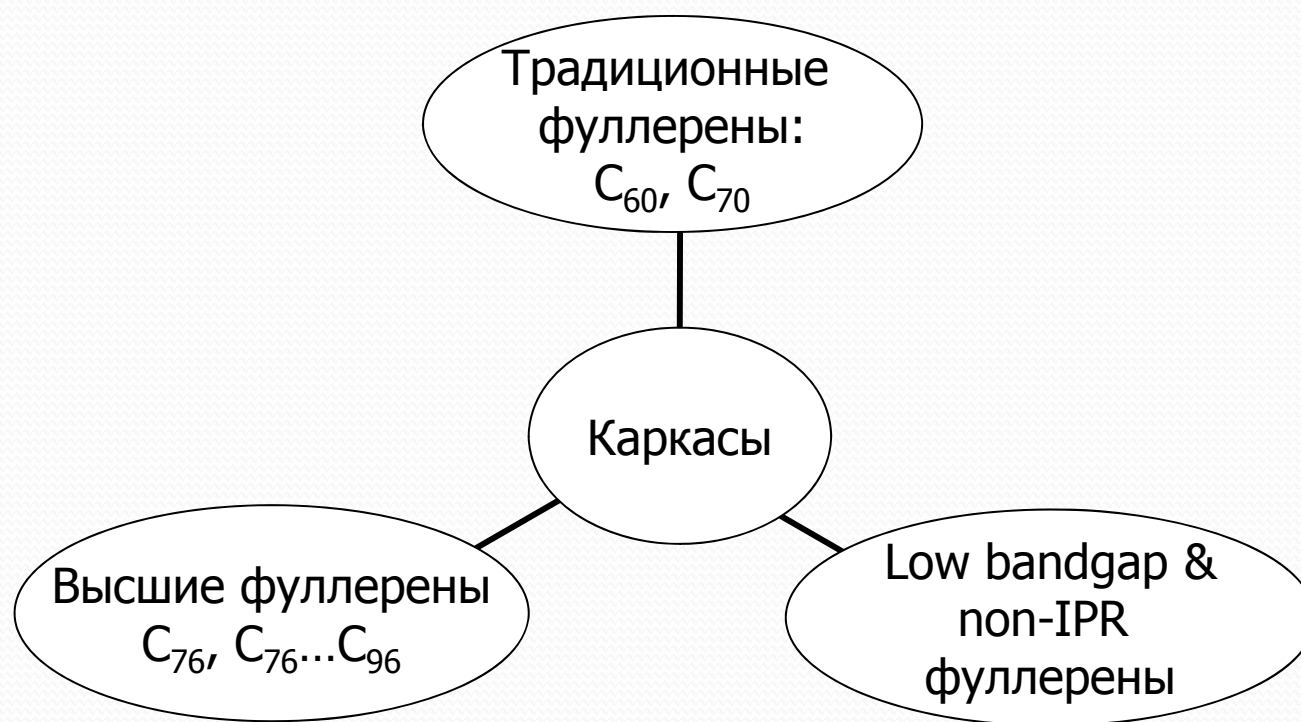
Биосфера Фуллера

$$V - P + \Gamma = 2$$

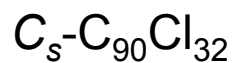
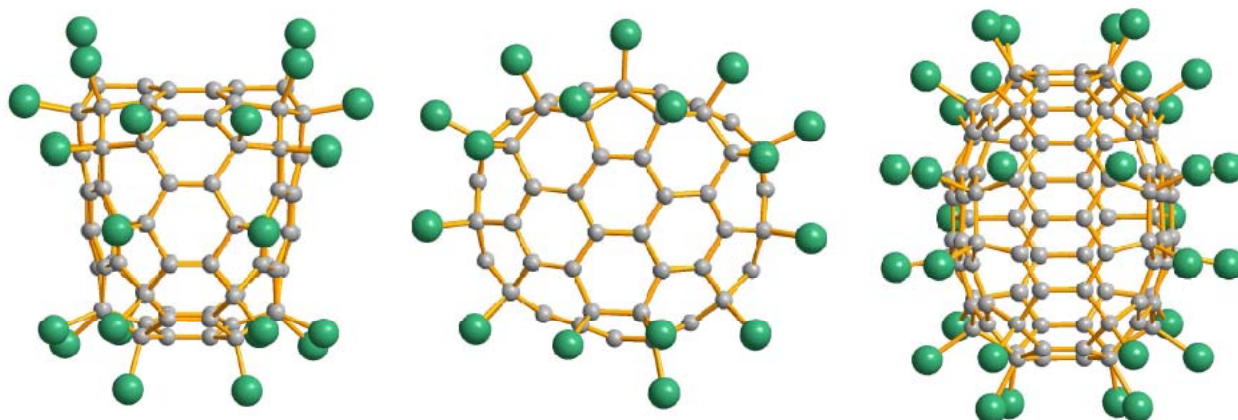
$$V = 2(10 + h)$$

Теорема Эйлера

Галогенпроизводные фуллеренов. Каркасы



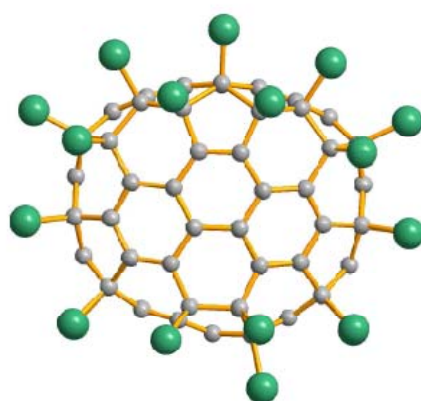
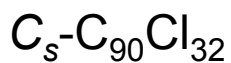
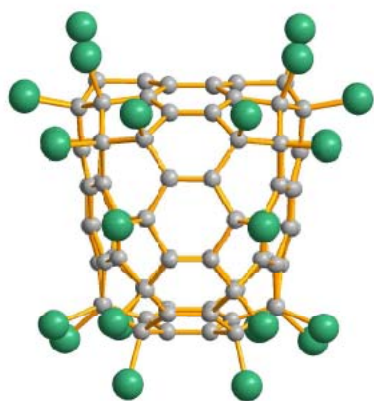
Галогенпроизводные фуллеренов. Каркасы



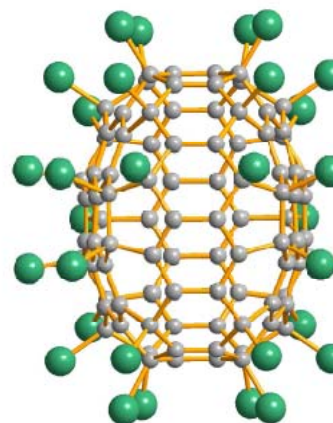
Высшие фуллерены
 $C_{76}, C_{76} \dots C_{96}$

Low bandgap &
non-IPR
фуллерены

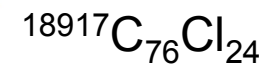
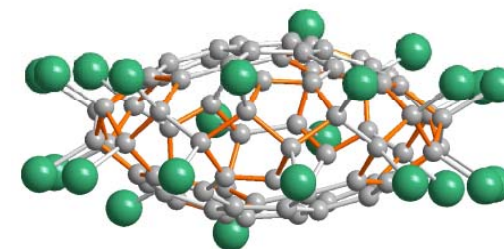
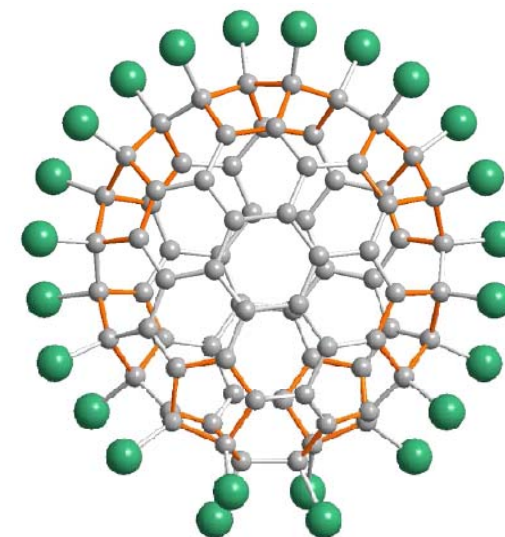
Галогенпроизводные фуллерены



Высшие фуллерены
 $C_{76}, C_{76} \dots C_{96}$



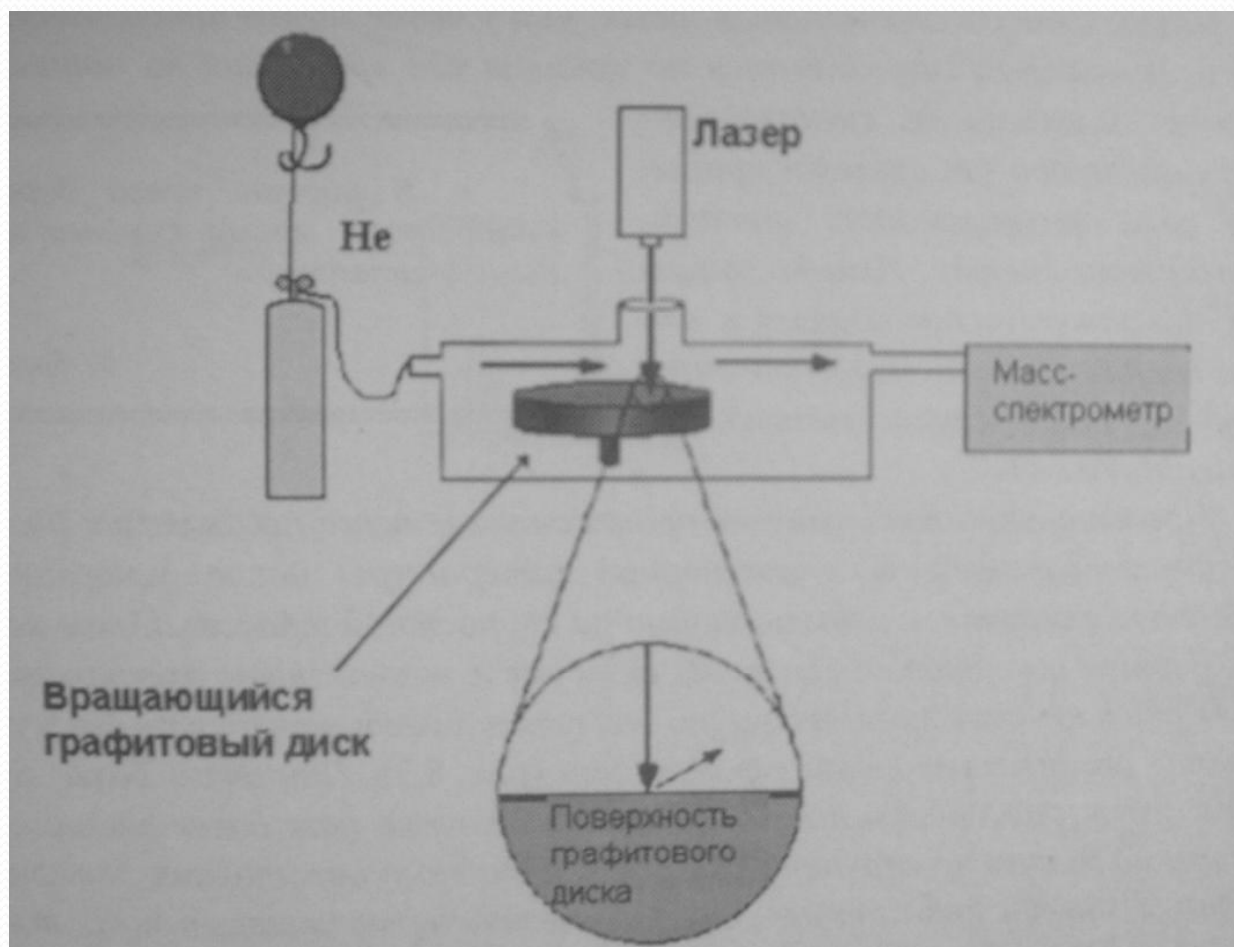
Low bandgap &
non-IPR
фуллерены



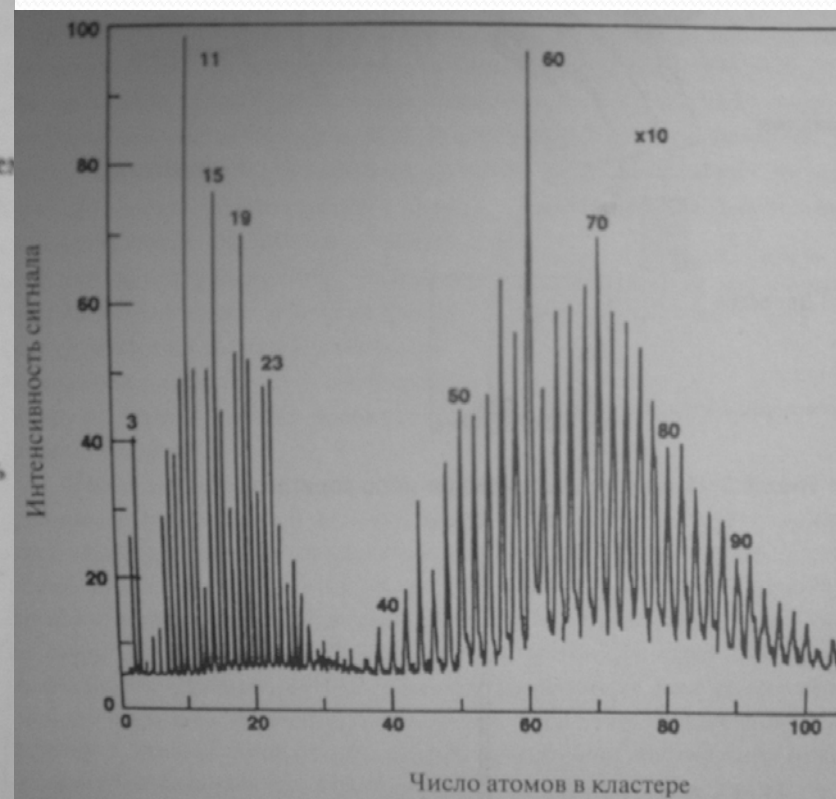
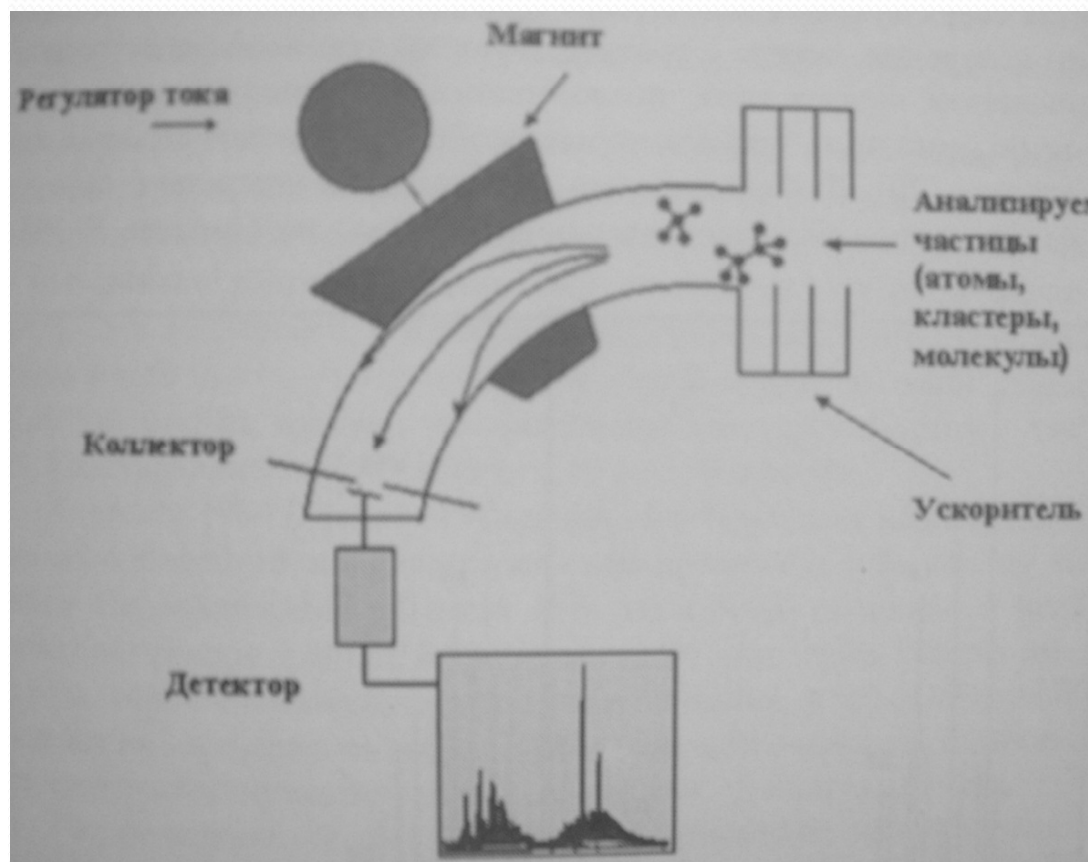
S.I. Toyanov *et al.*, *Angew. Chem. Int. Ed.* 2009, **48**, 2584 – 2589

S.I. Toyanov *et al.*, *Angew. Chem. Int. Ed.* 2009, **48**, 5904 – 5907

Получение углеродных кластеров 1



Получение углеродных кластеров 2



Галогенпроизводные фуллеренов. Адденды

Адденды

Галогены

$\text{CF}_3(\text{CF}_2)_n-$

$-(\text{CF}_2)_n-$

F	Cl	Br
$C_{3v}-C_{60}F_{18}$	$C_s-C_{60}Cl_6$	$C_s-C_{60}Br_6$
$T, C_3, C_1-C_{60}F_{36}$	$T_h-C_{60}Cl_{24}$	$C_{2v}-C_{60}Br_8$
$D_3, S_6-C_{60}F_{48}$	$D_{3d}-C_{60}Cl_{30}$	$T_h-C_{60}Br_{24}$
<hr/>		
$C_{60}F_n, n=2-48$		

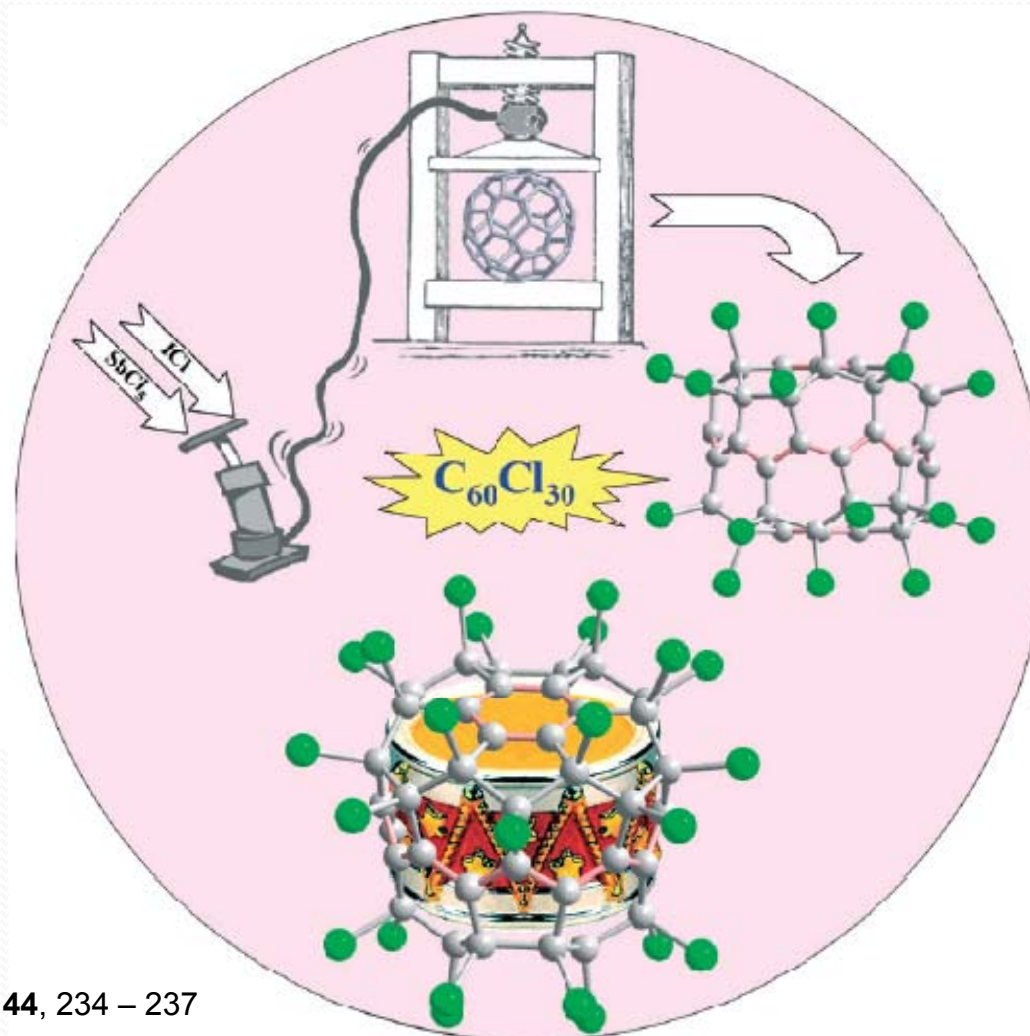
Галогенпроизводные фуллеренов. Адденды

Адденды

Галогены →

$\text{CF}_3(\text{CF}_2)_n-$

$-(\text{CF}_2)_n-$



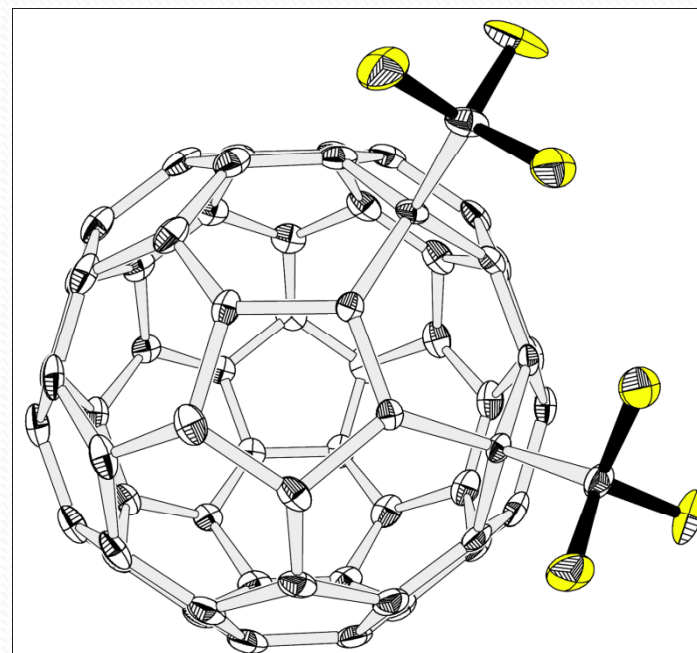
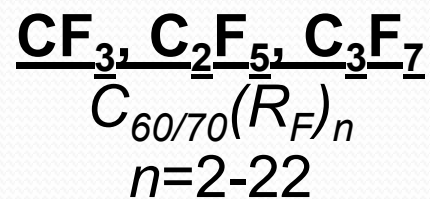
Галогенпроизводные фуллеренов. Адденды

Адденды

Галогены

$\text{CF}_3(\text{CF}_2)_n-$

$-(\text{CF}_2)_n-$



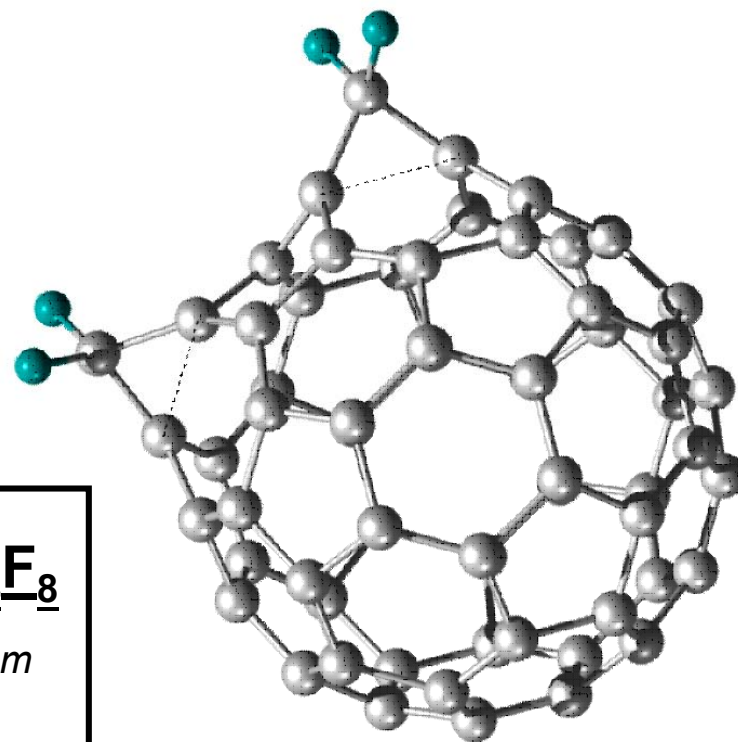
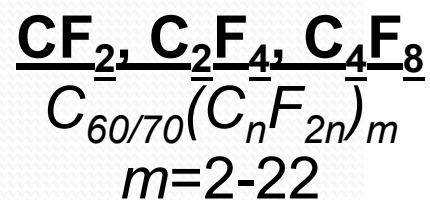
Галогенпроизводные фуллеренов. Адденды

Адденды

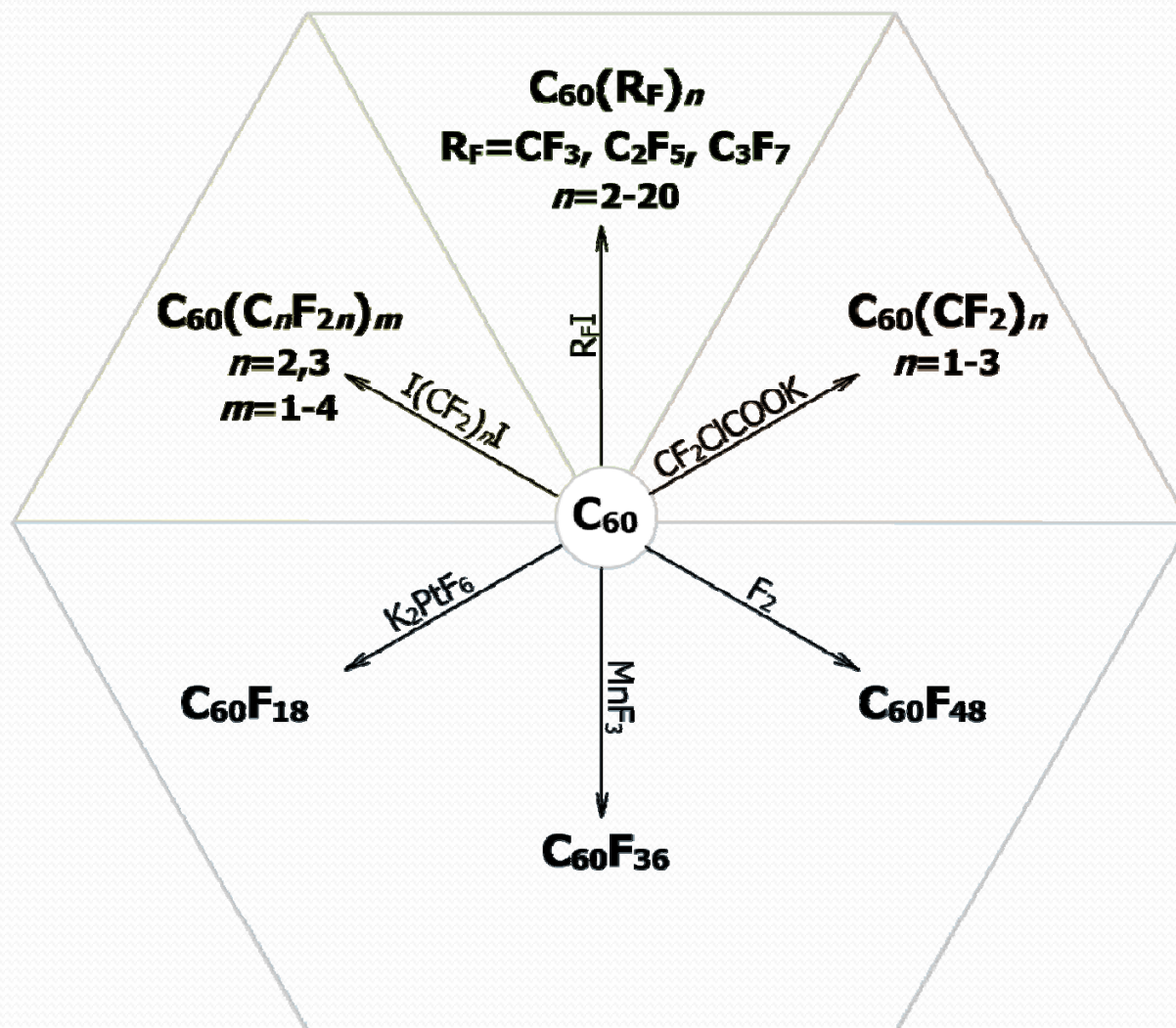
Галогены

$\text{CF}_3(\text{CF}_2)_n-$

$-(\text{CF}_2)_n-$

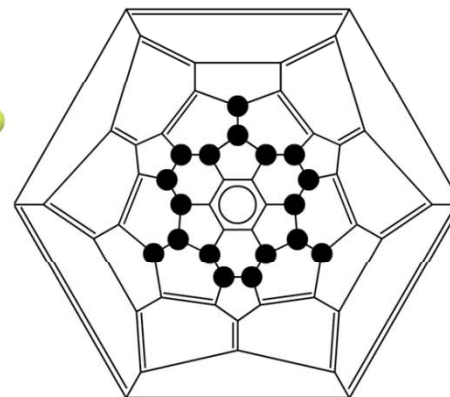
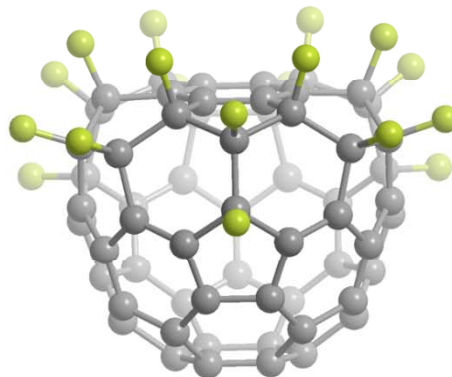
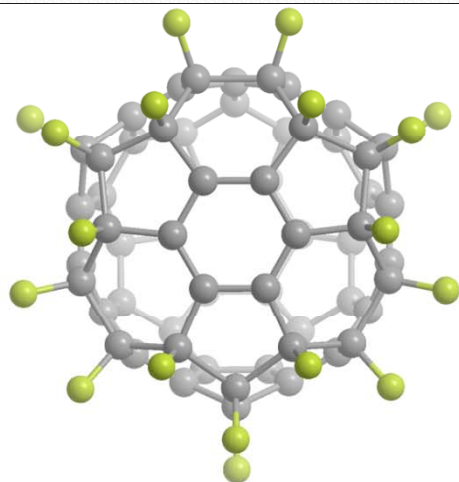


Синтетические подходы

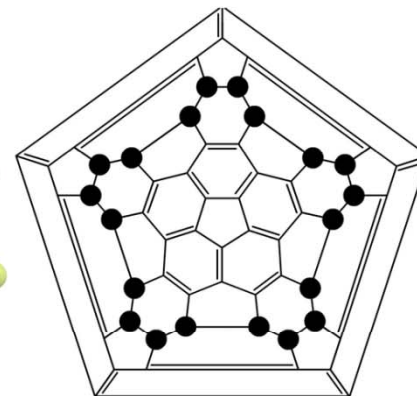
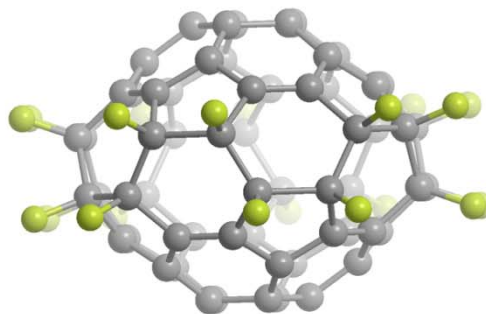
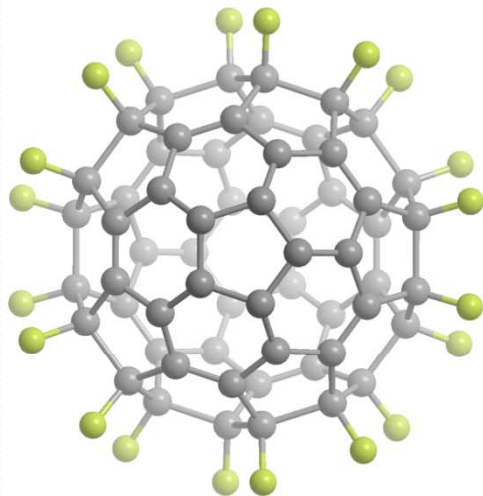


Строение фтор[60]фуллеренов. Большая разница $C_{60}F_{18}$ и $C_{60}F_{20}$?

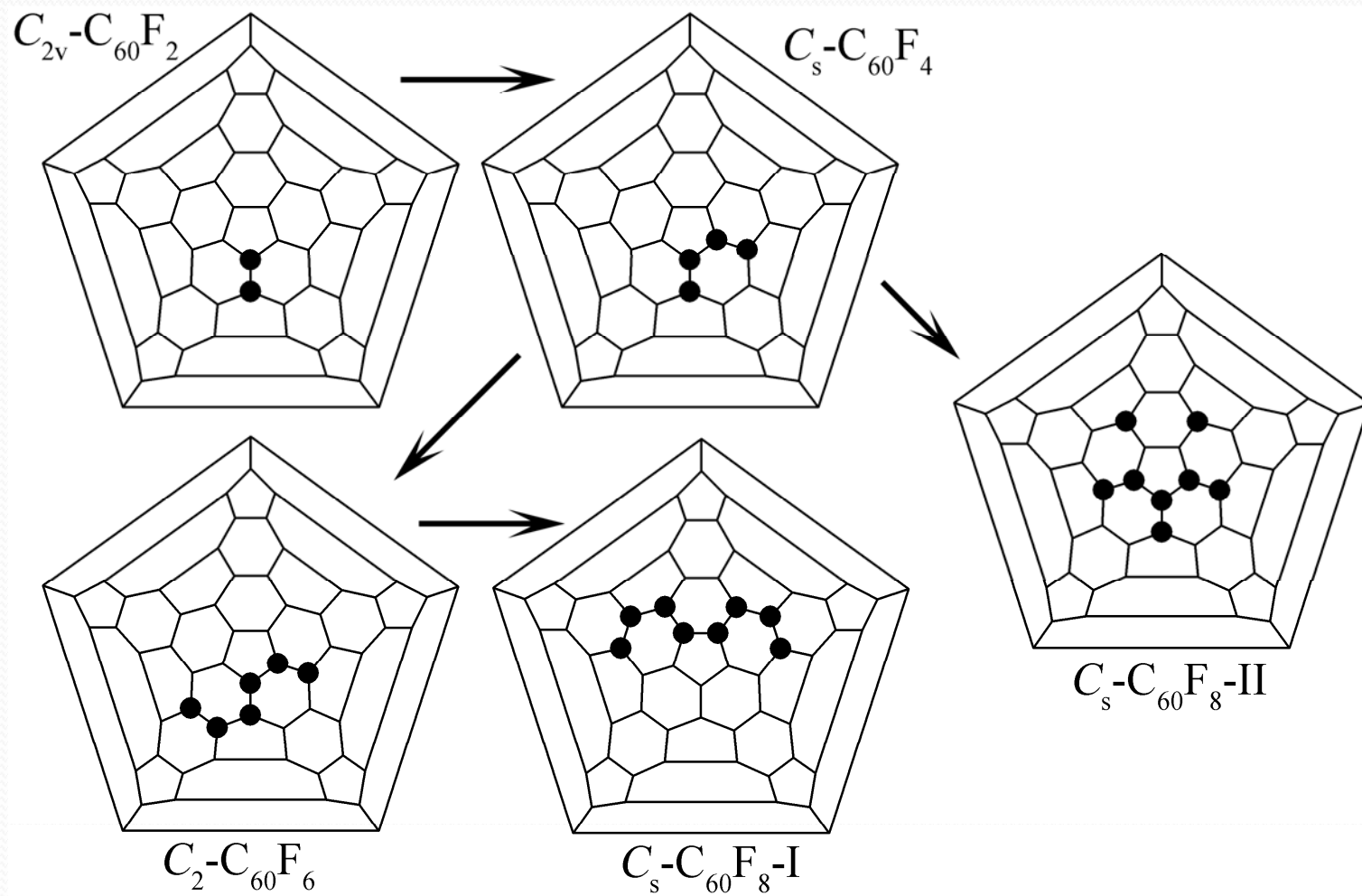
$C_{3v}-C_{60}F_{18}$



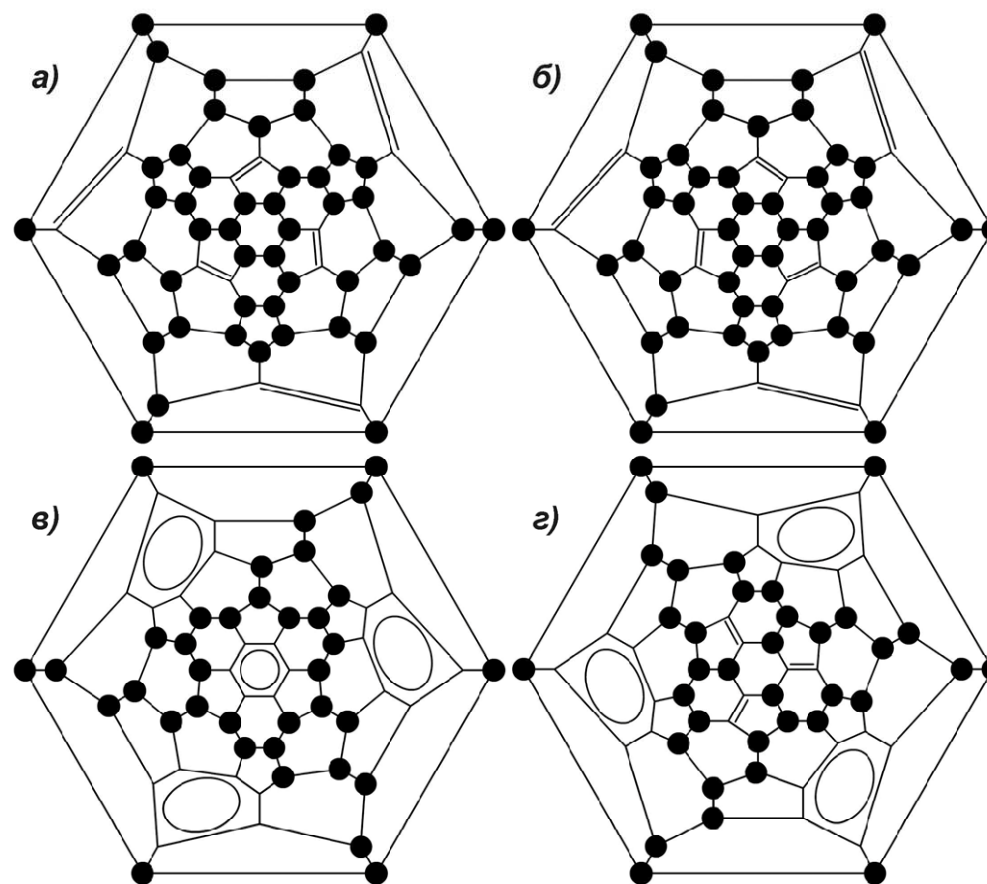
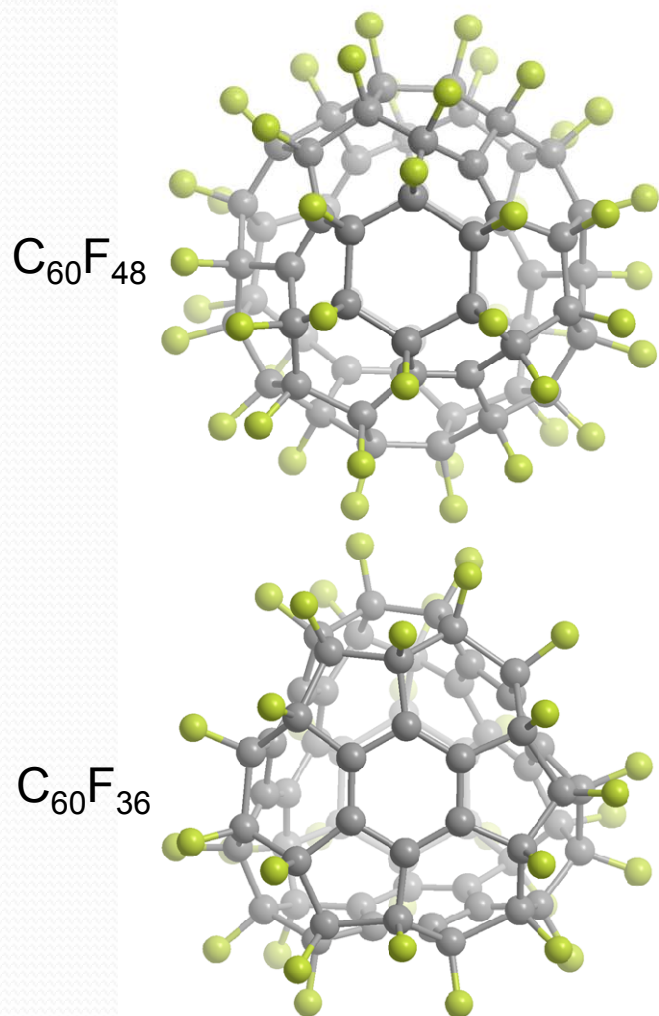
$D_{5d}-C_{60}F_{20}$



Низшие фтор[60]фуллерены



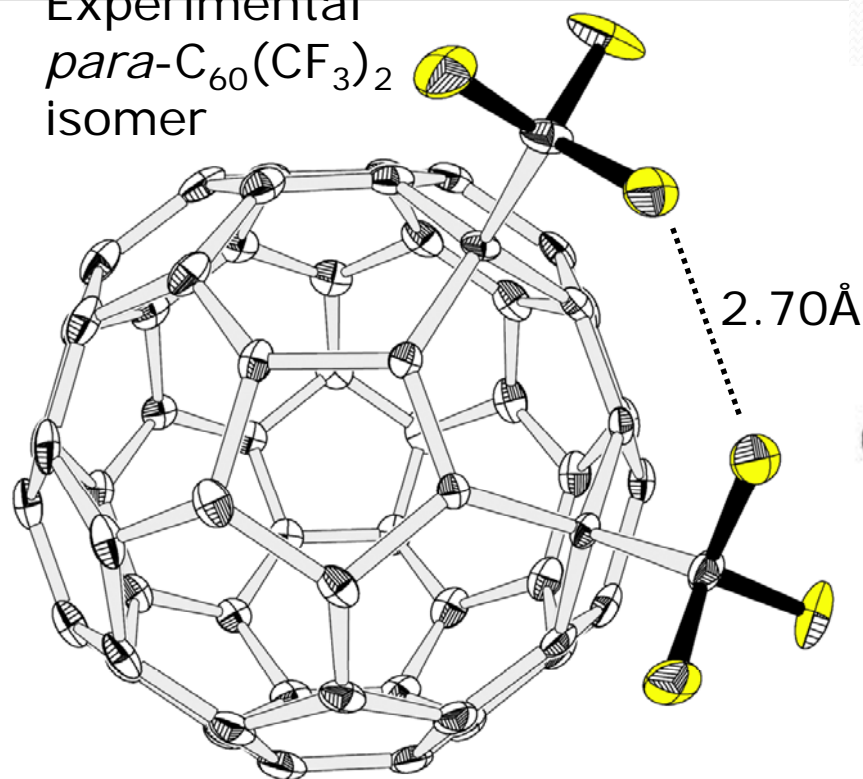
Высшие фтор[60]фуллерены



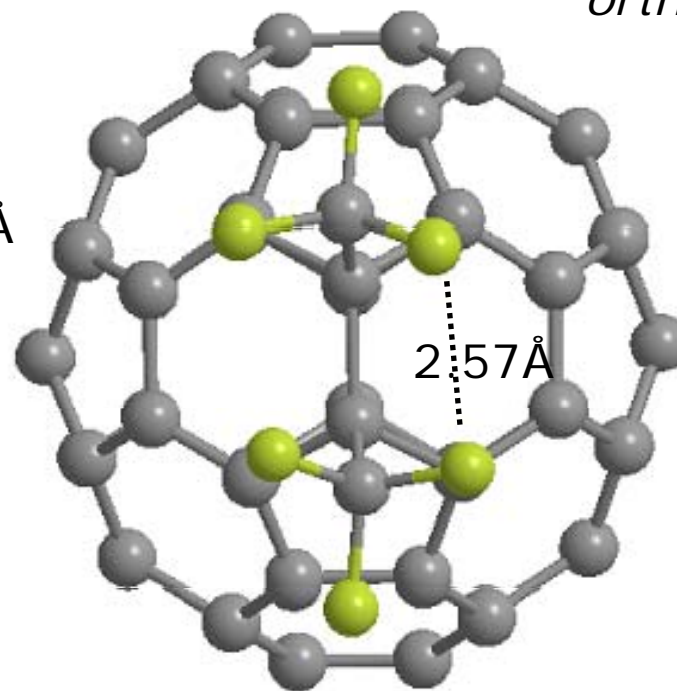
Трифторметил[60]фуллерены.

Строение $C_{60}(CF_3)_2$

Experimental
para- $C_{60}(CF_3)_2$
isomer



Model of
ortho- $C_{60}(CF_3)_2$
isomer

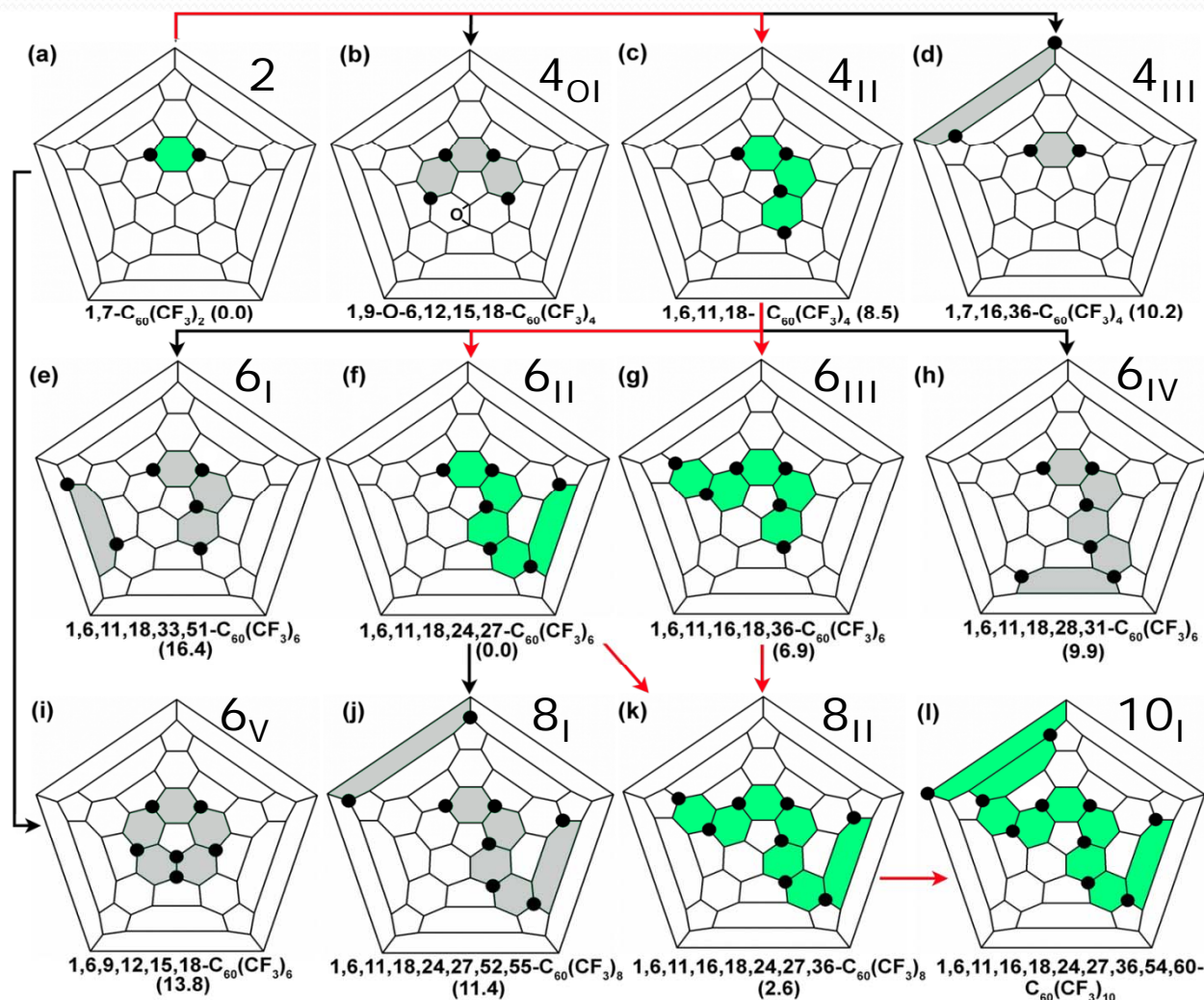
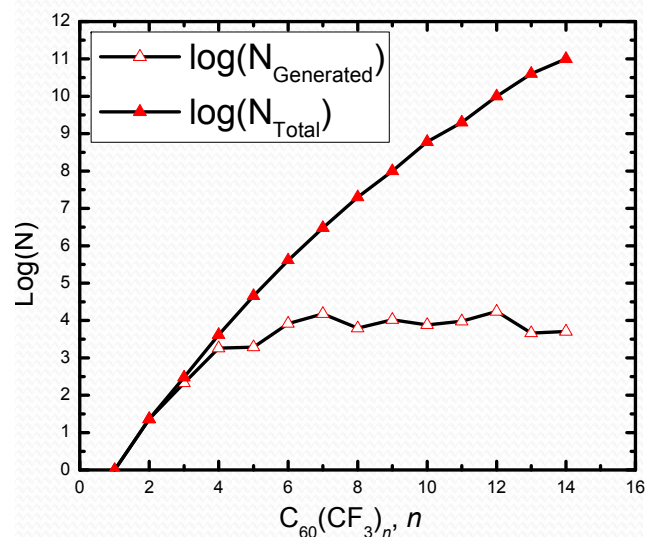


$C_{60}(CF_3)_2 \cdot C_6H_5CH_3$, 150 K
Monoclinic $P2_1$
 R_1/wR_2 0.055/0.140

$$E_{ortho} - E_{para} \sim 32 \text{ kJ} \cdot \text{mol}^{-1}$$

Dorozhkin E.I. *et al. Eur. J. Org. Chem.*, 2007, 5082-5094

Трифторметил[60]фуллерены.

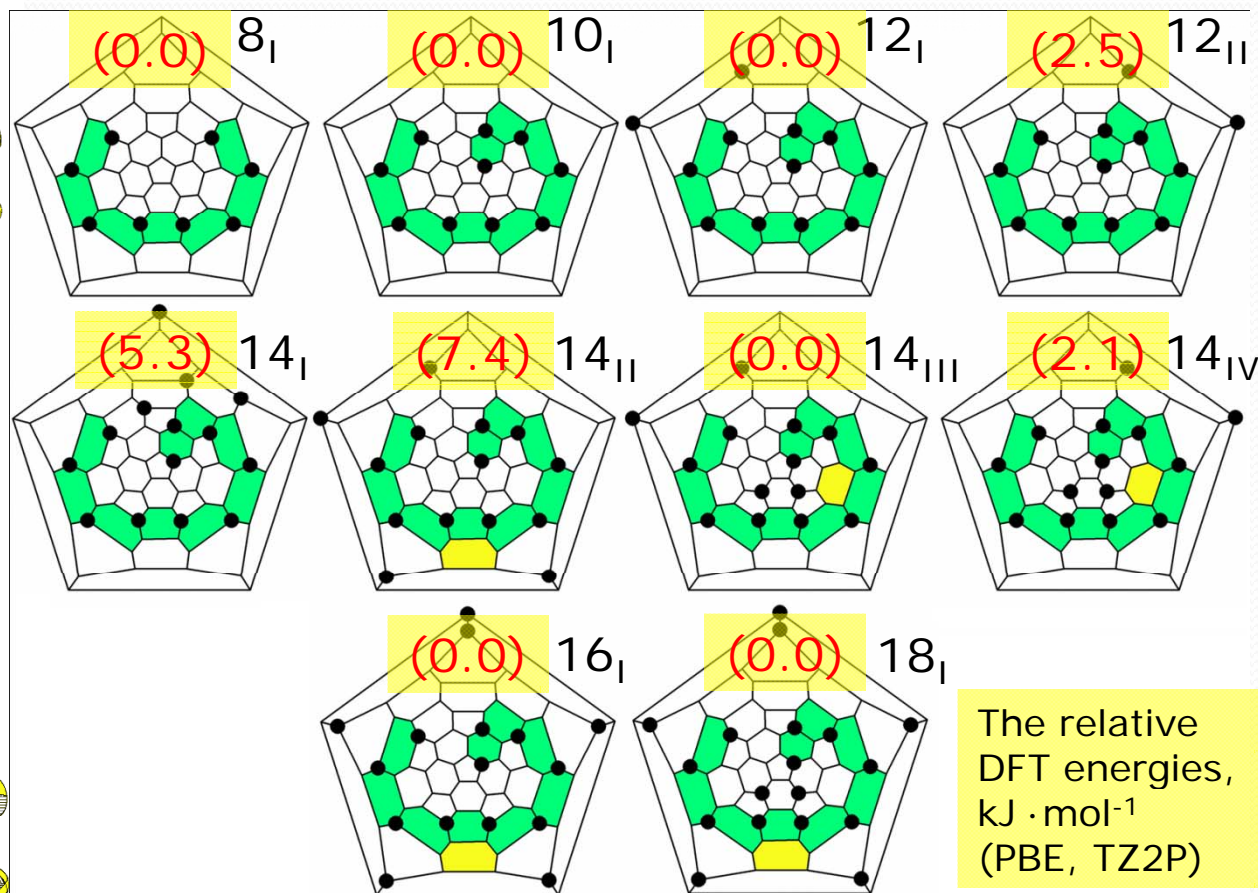
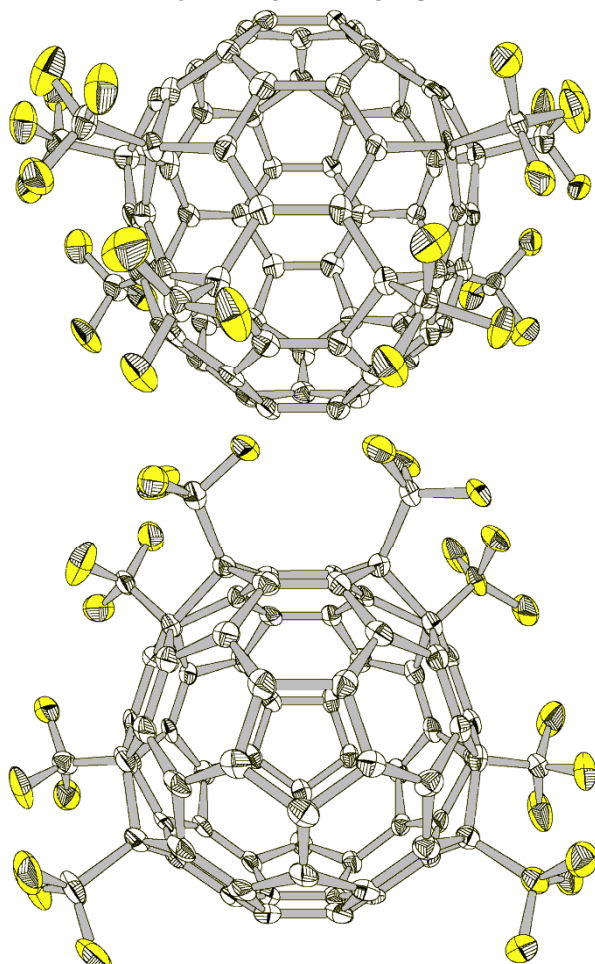


Количество охарактеризованных соединений $C_{60}F_n$, $C_{60}(CF_3)_n$, $C_{70}(CF_3)_n$

$C_{60}F_n$		$C_{60}(CF_3)_n$		$C_{70}(CF_3)_n$	
$n=$	Str. Data	$n=$	Str. Data	$n=$	Str. Data
2	1*	2	1	2	1*
4	1*	4	2	4	1*
6	1*	6	3+2*	6	1+ 1*
8	2*	8	2	8	1+ 1*
16	1	10	4	10	1
18	1	12	3	12	2
20	1*	14	2	14	4
24	1*	16	3	16	1
36	3	18	1	18	1
38	1*				
48	2				
Об.	7+8*	Об.	21+2*	Об.	11+4*

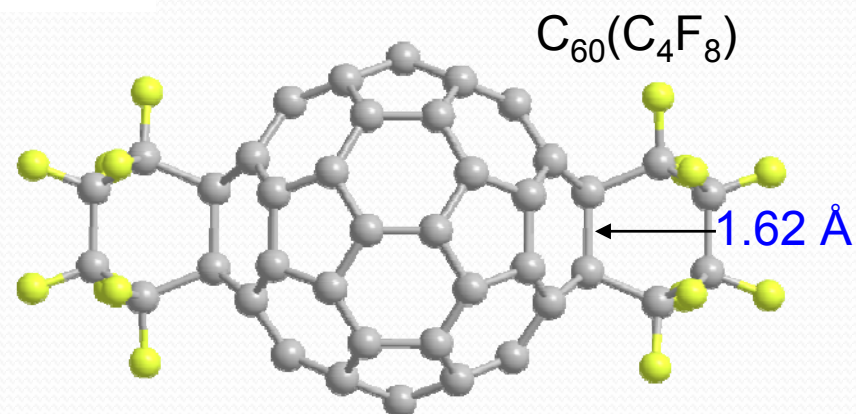
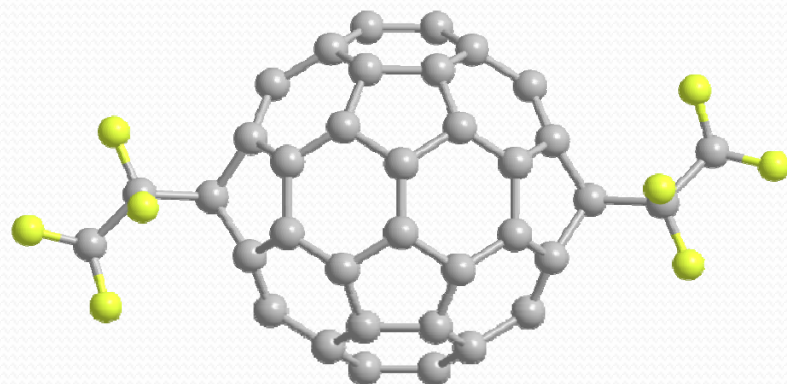
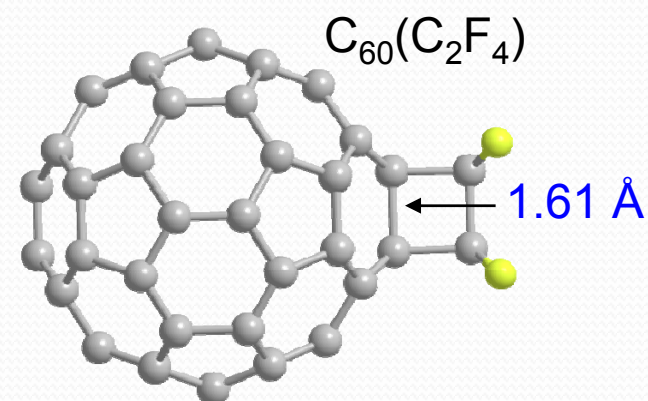
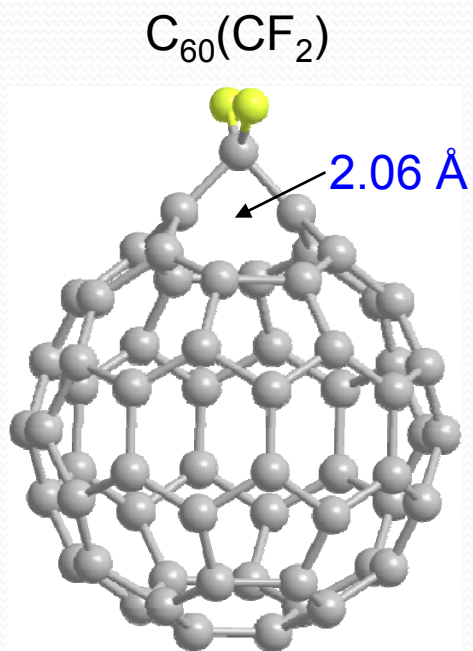
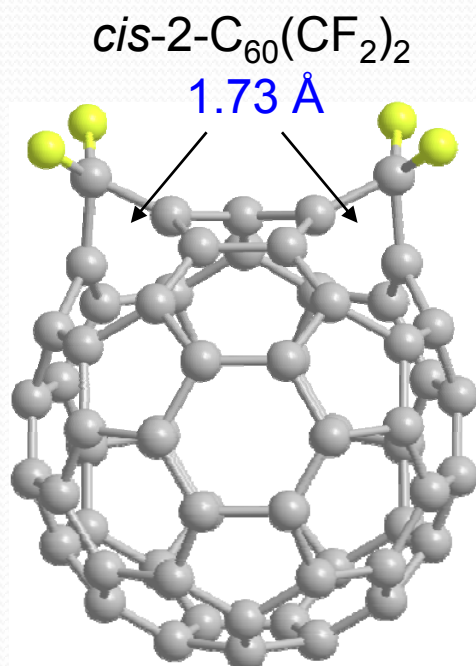
C_{70} : проще? $C_{70}(CF_3)_n$, $n = 8-18$

C_s - $C_{70}(CF_3)_8$ -I



Avdoshenko S.M. *et al.*, *Chem. Commun.*, 2006, 2463 and refs. herein
 Kareev I.E. *et al.*, *Angew. Chem. Int. Ed.*, 2005, **44**, 7984

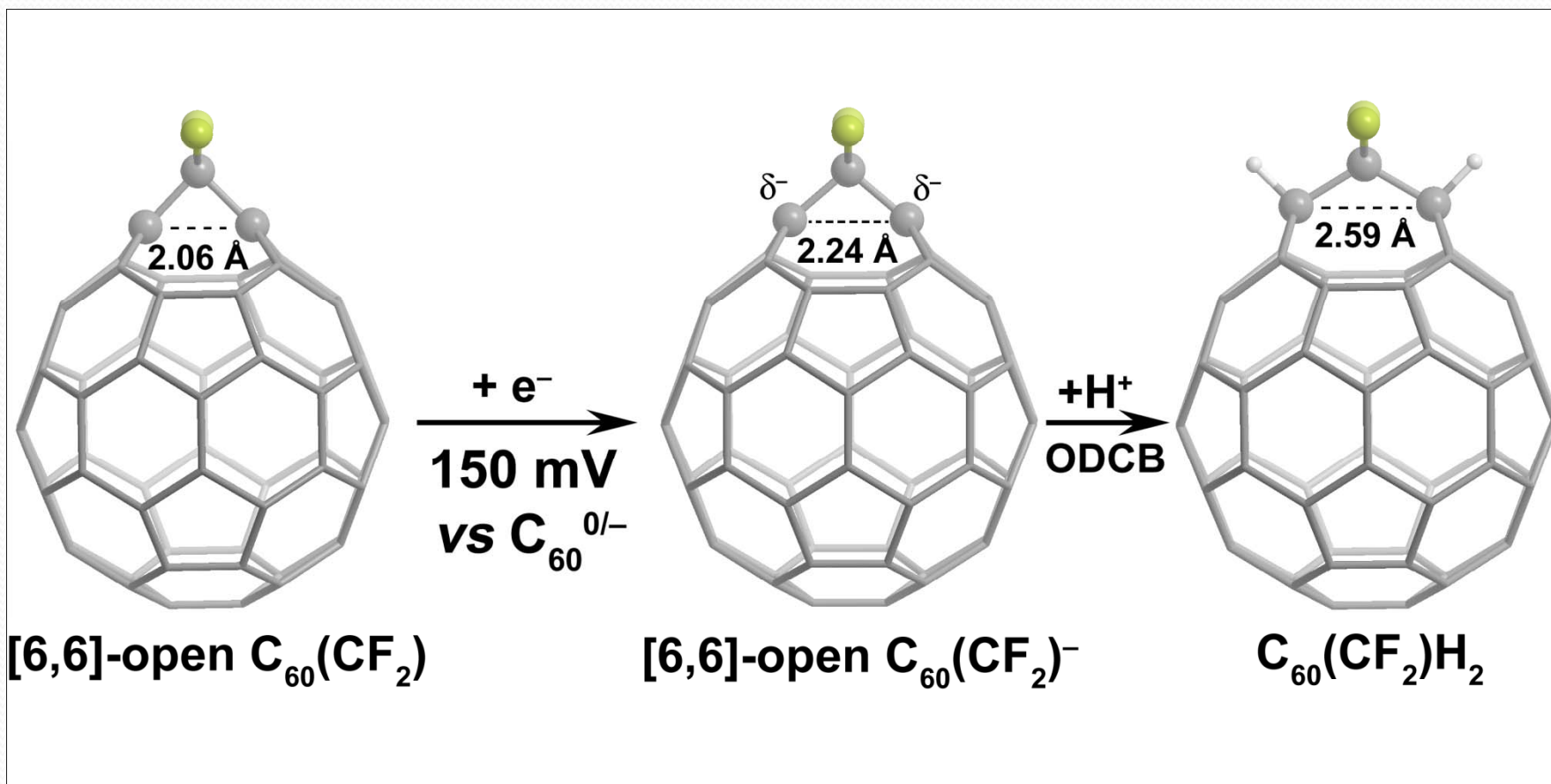
Бивалентные адденды



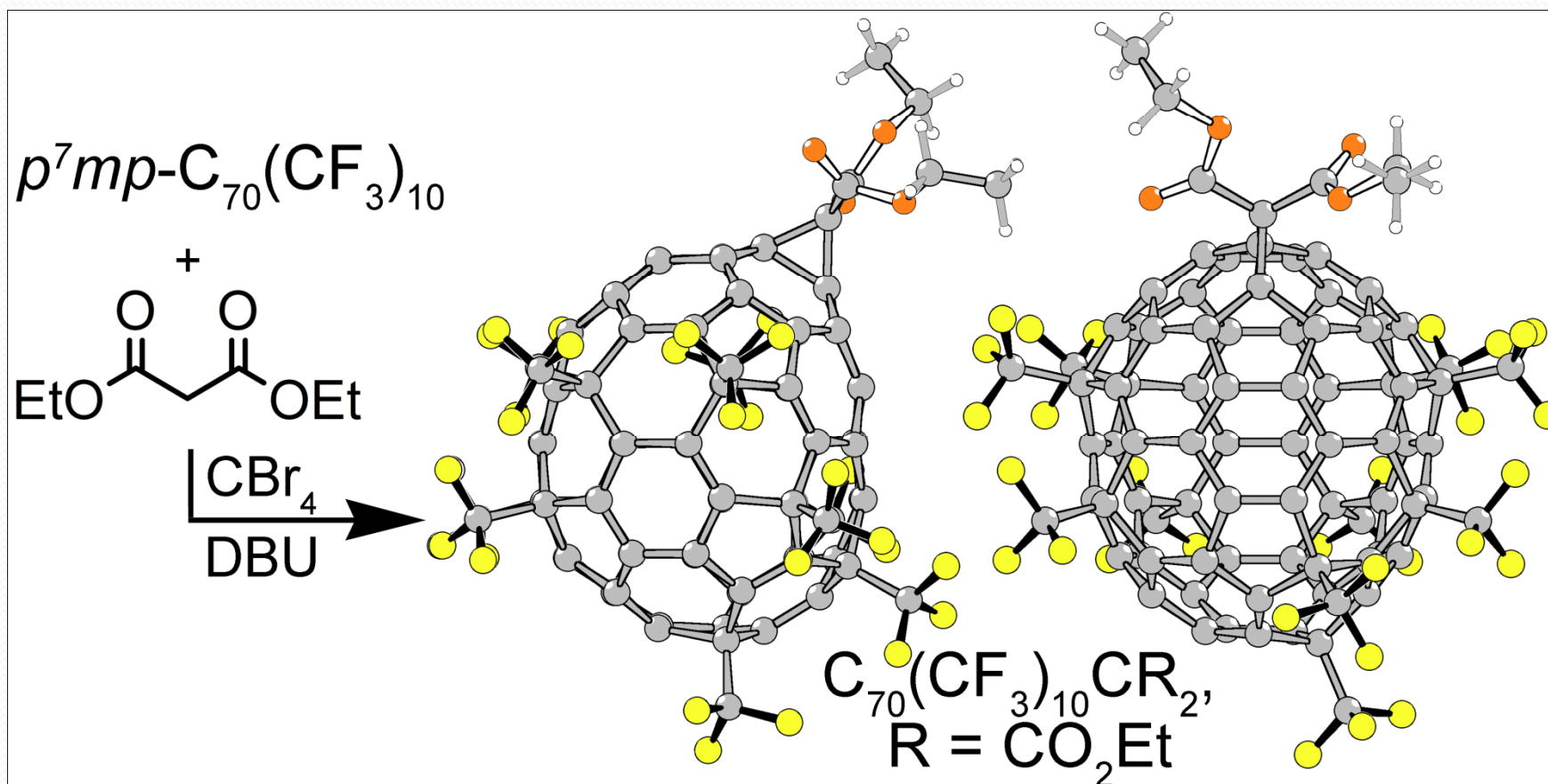
Мотивы заполнения каркаса

- 1,2-контакты для малых групп и 1,3-1,4-контакты для объемных групп
- Локализация аддендов
- Выделение уплощенных ароматических фрагментов и двойных связей

Протонирование аниона $C_{60}(CF_2)^-$



Модификация фторсодержащих производных фуллеренов



Принцип разделения зарядов. Построение устройств на основе органических полупроводников

