

МАТЕРИАЛЫ КОНФЕРЕНЦИИ
ПО ФИЗИЧЕСКОЙ ХИМИИ (ЧЕРНОГОЛОВКА)

УДК 544.163.2

ОБЪЕМ ФУЛЛЕРЕНОВОГО КАРКАСА И НЕАДДИТИВНОСТЬ
ПОЛЯРИЗУЕМОСТИ ЭНДОФУЛЛЕРЕНОВ И ГИДРИРОВАННЫХ
ЭНДОФУЛЛЕРЕНОВ С ИНКАПСУЛИРОВАННЫМИ АТОМАМИ
БЛАГОРОДНЫХ ГАЗОВ

© 2020 г. А. Д. Закирова^а, Д. Ш. Сабиров^{а,*}

^а Российская академия наук, Уфимский федеральный исследовательский центр, Институт нефтехимии и катализа,
Уфа, Россия

* e-mail: diozno@mail.ru

Поступила в редакцию 18.07.2019 г.

После доработки 18.07.2019 г.

Принята к публикации 17.09.2019 г.

Методом теории функционала плотности РВЕ/3 ζ изучена поляризуемость эндоэдральных комплексов фуллеренов и гидридов фуллеренов с атомами благородных газов Ng@C_N (N = 20, 24, 28, 30, 36, 50, 60, 70; X = He, Ne, Ar), Kr@C_N (N = 28, 30, 36, 50, 60, 70), Xe@C_n (n = 50, 60, 70), C₆₀H_n (n = 2, 6, 18, 36) и C₂₀H_n (n = 2, 6, 12, 20). Установлено, что отклонение рассчитанных значений средней поляризуемости эндоэдральных комплексов от аддитивной схемы коррелирует с изменением объемов фуллереновых каркасов C_N и C_{20/60}H_n при инкапсулировании. Изменение объема определяет абсолютную величину отклонения средней поляризуемости от аддитивности, тогда как его знак зависит от направления переноса заряда в эндоэдральном комплексе.

Ключевые слова: эндофуллерены, поляризуемость, объем, методы теории функционала плотности, аддитивность

DOI: 10.31857/S0044453720050295

Молекулы фуллеренов имеют внутреннюю полость достаточных размеров для образования комплексов типа “гость–хозяин”, называемых эндофуллеренами или эндоэдральными комплексами [1]. Примером таких комплексов являются эндофуллерены с атомами благородных газов Ng@C₆₀ (Ng = He–Xe), полученные еще в ранних работах по химии фуллеренов (см. введение к работе [2] и некоторые ключевые статьи [3–5]). Физические и химические свойства Ng@C₆₀ (и аналогичных комплексов других фуллеренов) изучались теоретически и экспериментально. Например, ранее с использованием различных квантово-химических методов были изучены их стабильность [6, 7], реакционная способность [2], механические свойства [8], поляризуемость [9–12], механизм образования [13–15] и др.

Фуллереновый каркас благодаря замкнутости своей структуры и наличию сильного собственного электрического поля способен экранировать инкапсулированные атомы и молекулы от внешних электрических полей. Эта способность к экранированию находит свое количественное выражение в поляризуемости (α) эндоэдральных комплексов: обычно для эндофуллеренов с ато-

мами благородных газов [9–11] и металлов [11, 16–18], нитридными кластерами [19], молекулами [11, 20–24] и молекулярными комплексами [25, 26] средняя поляризуемость меньше суммы значений α изолированных гостя и хозяина (фуллерена). Нами было показано, что отклонение средней поляризуемости эндофуллеренов от аддитивности может быть как отрицательным – для комплексов C₆₀ (депрессия), так и положительным – в случае малых фуллеренов (экзальтация поляризуемости) [10]. Значения депрессии поляризуемости эндофуллеренов используются для оценки диэлектрического экранирования эндоатомов фуллереновым каркасом [18, 25].

Известно, что при образовании комплексов Ng@C_N происходит растяжение углерод-углеродных связей фуллеренового каркаса [7, 27, 28], однако связь между структурными параметрами и поляризуемостью эндофуллеренов не изучалась. Между тем известно, что для многих химических соединений поляризуемость и молекулярный объем являются коррелируемыми величинами [29, 30]. В качестве параметра, характеризующего изменение структуры фуллеренового каркаса при образовании эндоэдральных комплексов, удобно

использовать т. наз. ядерный объем – объем полиэдра, построенного на ядрах атомов углерода, составляющих каркас фуллерена [31, 32]. В частности, этот структурный параметр был использован нами в качестве координаты реакции при изучении взаимодействия инкапсулированных молекул с внутренней поверхностью фуллерена в комплексах $\text{H}_2\text{O}@C_{60}$ и $\text{CH}_4@C_{60}$ [21, 22], а также в качестве вспомогательного геометрического параметра при изучении механизма образования $\text{He}@C_{60/70}$ и $\text{He}_2@C_{60/70}$ [15].

В настоящей работе методом теории функционала плотности РВЕ/3 ζ изучена связь между неаддитивностью поляризуемости эндофуллеренов и гидрированных эндофуллеренов с инкапсулированными атомами благородных газов и изменением ядерного объема каркаса фуллерена при их инкапсулировании.

МЕТОДЫ РАСЧЕТА

Расчеты проводились в программе ПРИРОДА (версия 11) [33] методом теории функционала плотности РВЕ/3 ζ . Обменно-корреляционный функционал с градиентной коррекцией Perdew–Burke–Ernzerhof (РВЕ) использовался в сочетании с валентно-расщепленным базисным набором 3 ζ , аппроксимирующим электронное строение атомов линейными комбинациями волновых функций гауссова типа. Этот метод нашел широкое применение в квантовохимических исследованиях фуллеренов и их производных, поскольку дает теоретические оценки их строения и физико-химических свойств, хорошо согласующиеся с известными экспериментальными данными (см. обзорные [34, 35] и некоторые оригинальные статьи [36–41]). Ранее нами была показана применимость этого метода для изучения поляризуемости и объема ионов и эндоэдральных комплексов фуллеренов [10, 21, 22, 32, 34].

Строение соединений было полностью оптимизировано. Все найденные структуры соответствовали минимумам поверхностей потенциальной энергии (гессианы не содержат отрицательных собственных значений). Тензоры поляризуемости рассчитывали в произвольной системе координат в приближении конечного поля, согласно которому элементы тензора α_{ij} равны вторым производным полной энергии молекулы по компонентам наложенного однородного электрического поля:

$$\alpha_{ij} = -\frac{\partial^2 U}{\partial E_i \partial E_j}.$$

Элементы тензора использовали для расчета средней поляризуемости α :

$$\alpha = \frac{1}{3}(\alpha_{xx} + \alpha_{yy} + \alpha_{zz}).$$

Для расчета ядерного объема (далее – просто объема) оптимизированные геометрии соединений приводили в систему координат с началом в центре масс (что соответствует положению начала координат внутри каркаса). В каркасе фуллерена C_n имеется 12 пентагонов (Р) и $(n/2 - 10)$ гексагонов (Н). Соединяя начало координат с вершинами полиэдра, делили последний на $(n/2 + 2)$ непересекающихся симплексов и рассматривали объем каркаса как сумму объемов симплексов, построенных на пентагонах v_P и гексагонах v_H :

$$V(C_n) = \sum_{i=1}^{12} v_{P,i} + \sum_{i=1}^{n/2-10} v_{H,i}$$

Поскольку в общем случае Н и Р непланарны, для вычисления объемов v_P и v_H проводили триангуляцию тел, построенных на пентагонах и гексагонах, и вычисляли общий объем как сумму объемов треугольных пирамид $v^{(P)}$ и $v^{(H)}$:

$$V(C_n) = \sum_{i=1}^{12} \sum_{j=1}^3 v_{ij}^{(P)} + \sum_{i=1}^{n/2-10} \sum_{j=1}^4 v_{ij}^{(H)}.$$

Объемы пирамид $v^{(P)}$ и $v^{(H)}$ легко находятся по координатам составляющих их атомов. В работе для удобства значения V даются в Å^3 , значения α – в а.е. (1 а.е. = 0.148 Å^3).

ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ

Поляризуемость и объем эндофуллеренов $\text{Ng}@C_N$ ($N = 20, 24, 28, 30, 36, 50, 60$). Была изучена поляризуемость эндоэдральных комплексов фуллеренов с разным числом атомов углерода в молекуле N . Для каждого N были рассмотрены термодинамически наиболее устойчивые изомеры – C_{20} (C_i), C_{24} (D_{6d}), C_{28-2} (T_d), C_{30-3} (C_{2v}), C_{36-15} (D_{6h}), C_{50-271} (D_{5h}), C_{60} (I_h) и C_{70} (D_{5h}) (рис. 1) [42]. Строение $C_N, \text{Ng}@C_N$ ($N = 20, 24, 28, 30, 36, 50, 60, 70$; $\text{Ng} = \text{He}, \text{Ne}, \text{Ar}$), $\text{Kr}@C_N$ ($N = 28, 30, 36, 50, 60, 70$) и $\text{Xe}@C_N$ ($N = 50, 60, 70$) было оптимизировано без ограничений по симметрии. Для поиска равновесной геометрии эндофуллерена атом Х помещался в центр масс молекулы C_N и проводилась оптимизация. После оптимизации симметрия молекулярной системы не изменялась. Расчетные значения поляризуемости неинкапсулированных атомов, а.е.: He – 0.06, Ne – 1.49, Ar – 8.00, Kr – 11.56, Xe – 19.85.

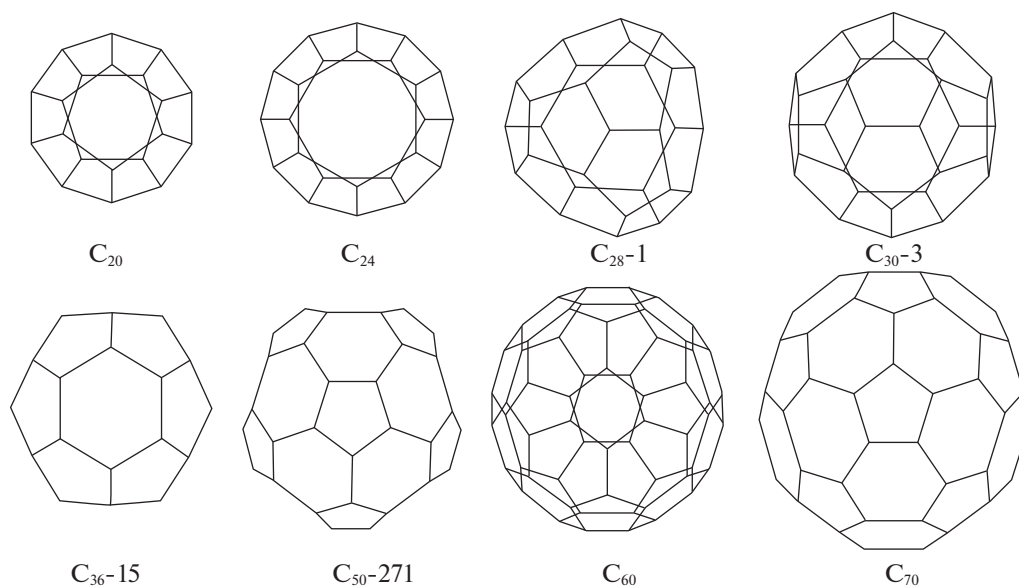


Рис. 1. Структура изученных фуллеренов.

Вычисленные значения средней поляризуемости (табл. 1) были проанализированы в рамках аддитивной схемы, основанной на предположении, что поляризуемость эндоэдрального комплекса $X@C_N$ складывается из значений средней поляризуемости изолированных X и C_N :

$$\alpha_{X@C_N}^{\text{add}} = \alpha_X + \alpha_{C_N}.$$

Отклонение от аддитивности вычисляли по формуле:

$$\Delta\alpha_{X@C_N} = \alpha_{X@C_N} - (\alpha_X + \alpha_{C_N}). \quad (1)$$

Рассчитанные по уравнению (1) отклонения $\Delta\alpha$ приведены в табл. 2. Абсолютное значение $\Delta\alpha$ в рядах $X@C_N$ с одинаковым N растет с увеличением ковалентного радиуса эндо-атома X (рис. 2),

что объясняется возрастающим взаимодействием электронных облаков эндо-атома и атомов углеродного каркаса. Для эндоэдральных комплексов C_{60} квантовохимические расчеты указывают на отрицательное отклонение от аддитивной схемы – депрессию поляризуемости ($\Delta\alpha < 0$). Этот результат находится в согласии с выводами более раннего теоретического исследования [9]. В настоящей работе установлено, что депрессия поляризуемости также характерна для эндоэдральных комплексов фуллеренов C_{30} , C_{36} , C_{50} и C_{70} .

Наоборот, в случае малых фуллеренов C_{20} , C_{24} и C_{28} наблюдается экзальтация поляризуемости ($\Delta\alpha > 0$), т.е. поляризуемость эндофуллерена увеличивается по сравнению с суммарной поляризуемостью исходных фуллерена и атома благород-

Таблица 1. Средняя поляризуемость фуллеренов и их эндоэдральных комплексов $Ng@C_N$, а.е.

Молекула-клетка	Без эндоатома	Комплекс с атомом Ng				
		He	Ne	Ar	Kr	Xe
$C_{20} (C_i)$	187.54	187.86	193.72	203.30	—	—
$C_{24} (D_{6d})$	217.95	217.30	220.37	231.82	244.86	—
$C_{28-2} (T_d)$	272.89	272.32	274.48	282.16	288.81	—
$C_{30-3} (C_{2v})$	287.69	287.28	288.59	294.80	297.05	—
$C_{36-15} (D_{6h})$	353.67	353.91	353.46	357.08	359.34	—
$C_{50-271} (D_{5h})$	466.34	465.88	466.15	468.07	468.66	470.54
$C_{60} (I_h)$	558.23	557.47	557.51	559.27	560.03	560.31
$C_{70} (D_{5h})$	693.23	692.18	692.06	693.59	694.86	695.47

Таблица 2. Неаддитивность средней поляризуемости эндофуллеренов Ng@C_N, а.е.

Молекула-клетка	Инкапсулированный атом Ng				
	He	Ne	Ar	Kr	Xe
C ₂₀ (C _i)	+0.26	+4.69	+7.76	–	–
C ₂₄ (D _{6d})	–0.71	+0.93	+5.87	–	–
C ₂₈₋₂ (T _d)	–0.63	+0.10	+1.27	–	–
C ₃₀₋₃ (C _{2v})	–0.47	–0.59	–0.89	–2.50	–
C ₃₆₋₁₅ (D _{6h})	–0.27	–1.25	–4.59	–8.15	–
C ₅₀₋₂₇₁ (D _{5h})	–0.52	–1.68	–6.27	–9.24	–15.66
C ₆₀ (I _h)	–0.91	–2.30	–7.05	–9.76	–17.86
C ₇₀ (D _{5h})	–1.11	–2.66	–7.64	–9.93	–17.61

ного газа ($\Delta\alpha < 0$ для всех комплексов He@C_N кроме He@C₂₀). В классической теории строения молекул [43] поляризуемость, имеющую размерность объема, связывают с заполнением пространства электронным облаком атома или молекулы. Очевидно, знак $\Delta\alpha$ определяется соотношением размеров атома гостя и молекулы-клетки в эндоэдральном комплексе.

Вычисленные объемы фуллереновых каркасов (табл. 3, рис. 3) указывают на то, что фуллерены расширяются при образовании эндоэдральных комплексов: наибольшей деформации подвергаются каркасы малых фуллеренов, а наименьшие значения ΔV наблюдаются для C₆₀ и C₇₀. Величина ΔV всегда положительна, тогда как знак $\Delta\alpha$ за-

висит от размера фуллерена, т.е. изменение объема фуллеренового каркаса коррелирует с абсолютным значением $\Delta\alpha$, но для знака $\Delta\alpha$ не является определяющим.

Мы оценили значения заряда эндо-атома q_X в эндофуллеренах с использованием анализа заселенностей по Малликену (табл. 4). Оказалось, что в случае эндофуллеренов, для которых характерна экзальтация поляризуемости ($\Delta\alpha > 0$), происходит частичный перенос электронной плотности с эндо-атома на фуллереновый каркас ($q_X > 0$), в случае же депрессии поляризуемости ($\Delta\alpha < 0$) наблюдается перенос в обратном направлении – на эндо-атом ($q_X < 0$). Таким образом, знак неаддитивности поляризуемости определяется перераспределением электронной плотности между фуллереновым каркасом и эндо-атомом, а именно, направлением переноса заряда. В эндоэдральных комплексах малых фуллеренов на фуллереновом каркасе сосредоточена избыточная электронная плотность, которая и является причиной экзальтации. Описанная выше закономерность не характерна для комплексов He@C_N (кроме N = 20), для которых $q_X > 0$, но $\Delta\alpha < 0$.

Согласно концепции сжатых атомов [27, 45], фуллереновый каркас оказывает давление на инкапсулированный атом, вследствие чего его электронное облако находится в сжатом метастабильном состоянии. Очевидно, частичный перенос заряда является способом уменьшить это давление, а его предпочтительное направление (с каркаса или на каркас) определяется размером фуллерена.

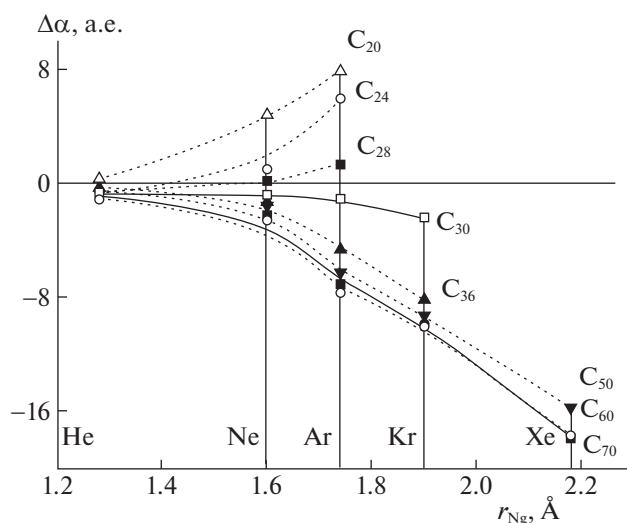


Рис. 2. Зависимости $\Delta\alpha$ эндофуллеренов от атомного радиуса благородного газа r_{Ng} (расчет – PBE/3 ζ ; значения r_{Ng} взяты из [44]).

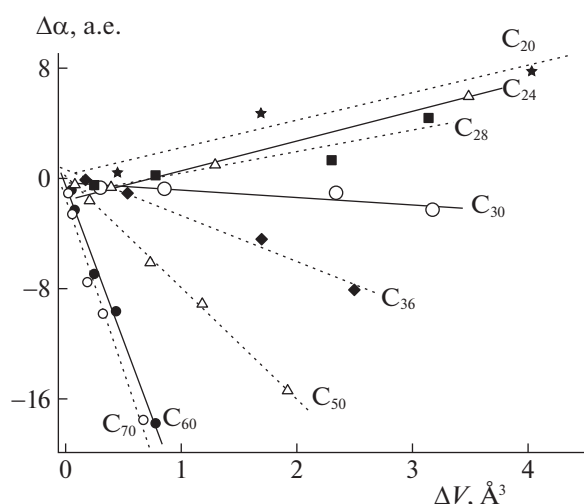


Рис. 3. Зависимости депрессии/экзальтации поляризуемости эндофуллеренов от изменения объема фуллерена при инкапсулировании.

Таблица 3. Объемы каркасов фуллеренов и их эндоэдральных комплексов с благородными газами, Å³

Молекула-клетка	$V(C_N)$	$V(X@C_N)$				
		He	Ne	Ar	Kr	Xe
$C_{20}(C_i)$	23.58	24.04 (0.45)	25.27 (1.69)	27.60 (4.02)	—	—
$C_{24}(D_{6d})$	33.55	33.96 (0.40)	34.86 (1.31)	37.03 (3.48)	—	—
$C_{28-2}(T_d)$	44.31	44.57 (0.26)	45.10 (0.79)	46.62 (2.31)	—	—
$C_{30-3}(C_{2v})$	49.43	49.75 (0.32)	50.30 (0.87)	51.77 (2.34)	52.61 (3.17)	—
$C_{36-15}(D_{6h})$	67.91	68.10 (0.19)	68.45 (0.55)	69.60 (1.70)	70.39 (2.48)	—
$C_{50-271}(D_{5h})$	119.11	119.20 (0.08)	119.33 (0.21)	119.85 (0.74)	120.31 (1.19)	121.04 (1.93)
$C_{60}(I_h)$	163.03	163.08 (0.05)	163.11 (0.08)	163.28 (0.25)	163.47 (0.44)	163.81 (0.78)
$C_{70}(D_{5h})$	208.35	208.39 (0.04)	208.42 (0.07)	208.54 (0.19)	208.69 (0.34)	209.03 (0.68)

Обозначения: $V(X@C_N)$ – объем фуллеренового каркаса в эндофуллерене $Ng@C_N$, $V(C_N)$ – объем исходного фуллеренового каркаса. В скобках приведены значения $\Delta V = V(X@C_N) - V(C_N)$.

Депрессия поляризуемости эндоэдральных комплексов гидридов фуллеренов $Ne@C_{20/60}H_n$. Для оценки влияния функционализации фуллеренового каркаса на величину депрессии поляризуемости эндофуллеренов были изучены эндоэдральные комплексы неона, в которых в качестве молекул-клеток выступают гидриды фуллеренов $C_{60}H_n$ ($n = 2, 6, 18, 36$) и $C_{20}H_n$ ($n = 2, 6, 12, 20$) (табл. 5). Выбор гидридов в качестве модельных соединений для этой цели обусловлен очень низкой поляризуемостью атома водорода [43]. Таким образом возможное влияние аддендов на величину $\Delta\alpha$ должно быть пренебрежимо мало. Предполагалось, что гидриды C_{60} изоструктурны соответствующим фторфуллеренам [46]; строение производных C_{20} взято из нашей предыдущей работы [12] (рис. 4 и 5).

Аналогично нефункционализированным фуллеренам, для эндоэдральных комплексов гидридов наблюдается отклонение от аддитивной схемы $\Delta\alpha$: положительное – для $Ne@C_{20}H_n$ и отрицательное – для $Ne@C_{60}H_n$ (табл. 5). Ожидалось, что значения $\Delta\alpha$ будут коррелировать со степенью функционализации фуллереновых каркасов C_{20} и C_{60} , т.е. числом атомов водорода n в $C_{20/60}H_n$, однако такой зависимости обнаружено не было (рис. 6).

Анализируя значения средней поляризуемости изученных соединений, можно увидеть, что $\alpha(C_NH_n)$ и $\alpha(Ne@C_NH_n)$ изменяются согласованно по мере увеличения n (рис. 6), т.е. для производных фуллеренов и их комплексов с Ne средняя поляризуемость возрастает в рядах $C_{20}H_{12} < C_{20}H_{20} < C_{20} < C_{20}H_2 < C_{20}H_6$ и $C_{60} < C_{60}H_2 < C_{60}H_{36} < C_{60}H_6 <$

$< C_{60}H_{18}$. Однако эти ряды отличаются от соответствующих трендов $\Delta\alpha$: для $Ne@C_{20}H_n - C_{20}H_6 < C_{20}H_{20} < C_{20} < C_{20}H_{12} < C_{20}H_2$; для $Ne@C_{60}H_n$: $-C_{60}H_2 < C_{60}H_6 < C_{60} < C_{60}H_{18} < C_{60}H_{36}$.

Углеродные каркасы молекул C_NH_n при инкапсулировании расширяются – об этом свидетельствуют рассчитанные значения изменения объема ΔV (табл. 5). Как оказалось, значения $\Delta\alpha$ и ΔV линейно коррелированы (рис. 7). Таким образом, фактором, определяющим величину неаддитивности поляризуемости (депрессии или экзальтации) является жесткость углеродного каркаса гидрированного фуллерена. Наибольшие значения депрессии $|\Delta\alpha|$ наблюдаются для молекул-клеток, практически не меняющих объем при инкапсулировании – C_{60} , $C_{60}H_2$ и $C_{60}H_6$. И наоборот

Таблица 4. Заряд эндо-атома в эндофуллеренах с инкапсулированными атомами благородных газов (анализ заселенностей по Малликену)

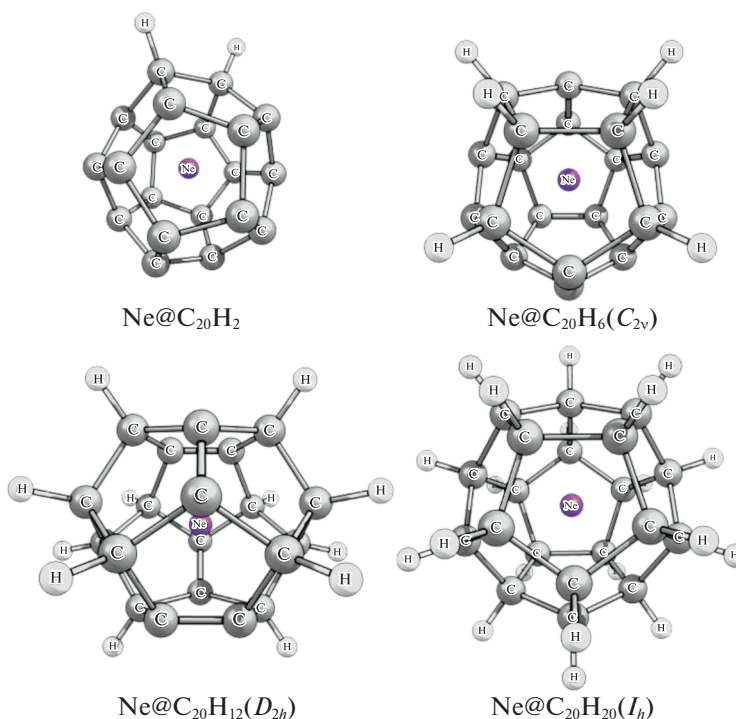
Молекула-клетка	Инкапсулированные атомы Ng				
	He	Ne	Ar	Kr	Xe
$C_{20}(C_i)$	+0.061	+0.158	+1.719	—	—
$C_{24}(D_{6d})$	+0.022	+0.024	+0.575	—	—
$C_{28-2}(T_d)$	+0.012	+0.092	+0.239	—	—
$C_{30-3}(C_{2v})$	+0.013	-0.049	-0.039	-0.116	—
$C_{36-15}(D_{6h})$	+0.004	-0.049	-0.079	-0.159	—
$C_{50-271}(D_{5h})$	+0.003	-0.005	-0.096	-0.143	-0.356
$C_{60}(I_h)$	+0.005	-0.015	-0.038	-0.071	-0.195
$C_{70}(D_{5h})$	+0.005	-0.016	-0.010	-0.027	-0.095

Таблица 5. Характеристики объема и поляризуемости $C_{60}H_n$ ($n = 0, 2, 6, 18, 36$), $C_{20}H_n$ ($n = 0, 2, 6, 12, 20$) и их эндоэдральных комплексов с неоном

Молекула-клетка	Пустая молекула		Комплекс $Ne@C_nH_n$		$\Delta\alpha$, а.е.	ΔV , Å^3
	α , а.е.	V , Å^3	α , а.е.	V , Å^3		
C_{20}	187.54	23.58	193.72	25.27	4.69	1.69
$C_{20}H_2$	190.89	23.92	198.56	25.76	6.18	1.84
$C_{20}H_6$	197.15	24.81	201.72	26.67	3.08	1.86
$C_{20}H_{12}$	182.37	26.18	188.65	27.88	4.79	1.7
$C_{20}H_{20}$	183.94	28.75	189.02	30.12	3.59	1.37
C_{60}	558.23	163.03	557.51	163.11	-2.21	0.084
$C_{60}H_2$	564.98	163.93	562.69	164.02	-3.78	0.087
$C_{60}H_6$	571.73	166.71	570.08	166.79	-3.14	0.085
$C_{60}H_{18}$	572.4	169.94	572.21	170.35	-1.68	0.414
$C_{60}H_{36}$ (C_1)	566.78	174.32	567.28	174.81	-0.99	0.491
$C_{60}H_{36}$ (C_3)	566.01	171.42	567.04	172.18	-0.46	0.763
$C_{60}H_{36}$ (T)	567.55	173.45	568.09	174.22	-0.95	0.779

рот, сильное расширение молекулы-клетки при инкапсулировании соответствует большим значениям экзальтации — положительного отклонения поляризуемости от аддитивной схемы.

Таким образом, с использованием метода теории функционала плотности установлено, что абсолютная величина отклонения средней поляризуемости эндоэдральных комплексов фуллеренов

**Рис. 4.** Строение комплексов $Ne@C_{20}H_n$ ($n = 2, 6, 12, 20$).

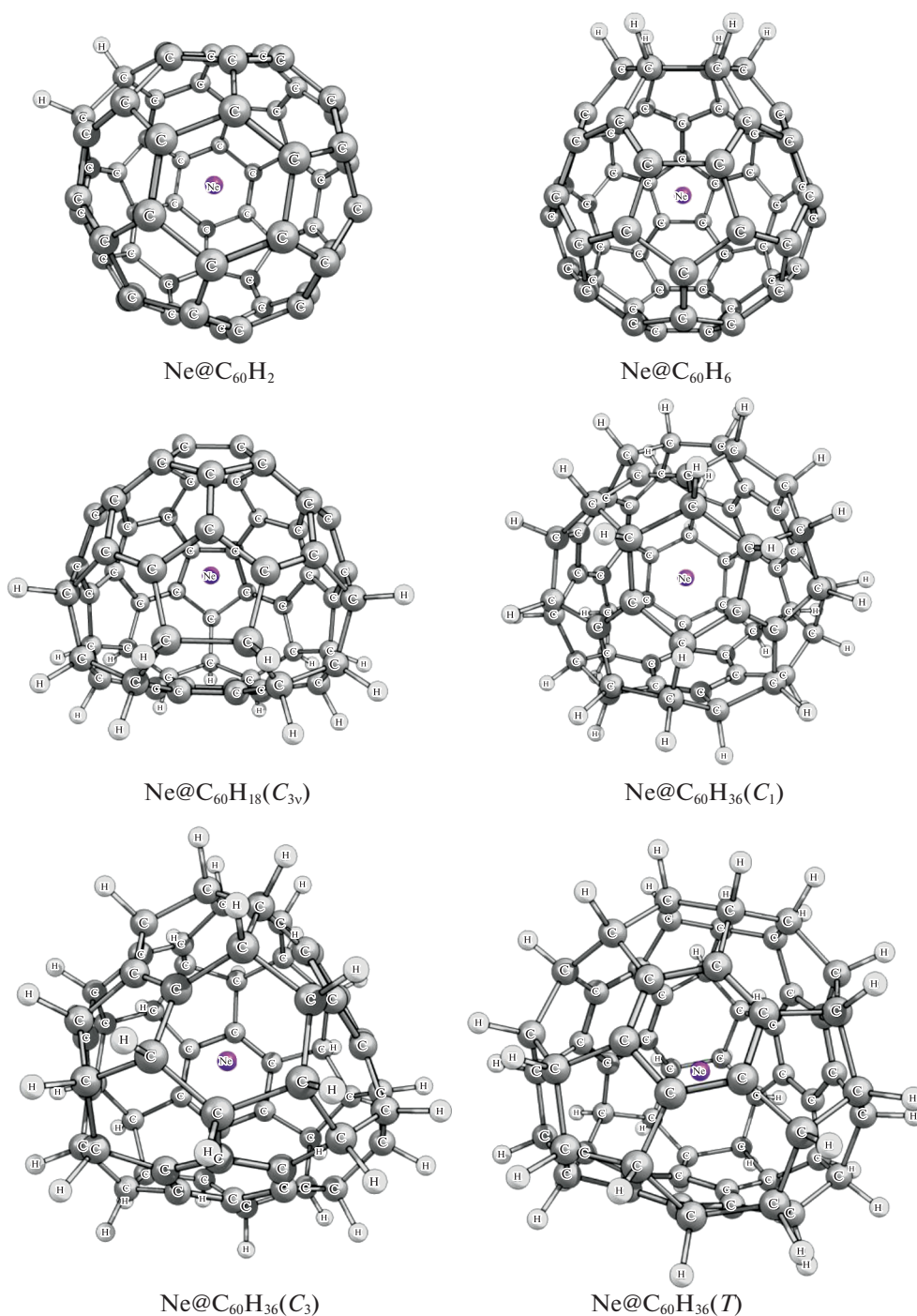


Рис. 5. Строение комплексов $\text{Ne@C}_{60}\text{H}_n$ ($n = 2, 6, 18, 36$).

и их гидридов с атомами благородных газов коррелирует с изменением объема фуллеренового каркаса при инкапсулировании. Знак неаддитивности поляризуемости изученных комплексов зависит от направления переноса заряда между фуллереновым каркасом и эндо-атомом: экзальтации поляризуемости эндофуллеренов $\leq \text{C}_{28}$ со-

ответствует перенос заряда на фуллерен, депрессии поляризуемости эндофуллеренов $\geq \text{C}_{30}$ — на эндо-атом. Значения депрессии/экзальтации поляризуемости эндоэдральных комплексов гидридов фуллеренов не коррелируют со степенью функционализации фуллеренового каркаса и определяются его жесткостью, которая также мо-

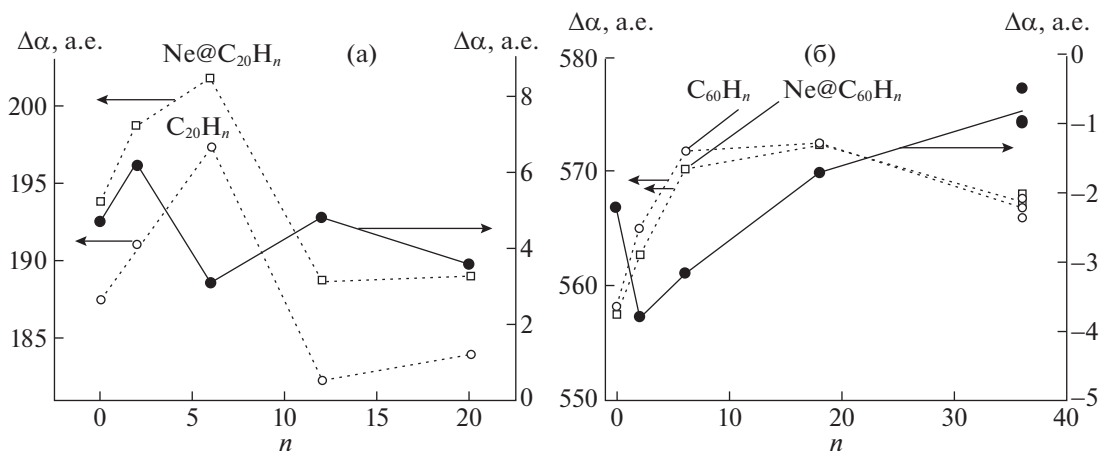


Рис. 6. Зависимости значений α и $\Delta\alpha$ для гидридов C_{20} (а) и C_{60} (б) и их эндоэдральных комплексов с неоном от числа аддендов в молекуле-клетке n .

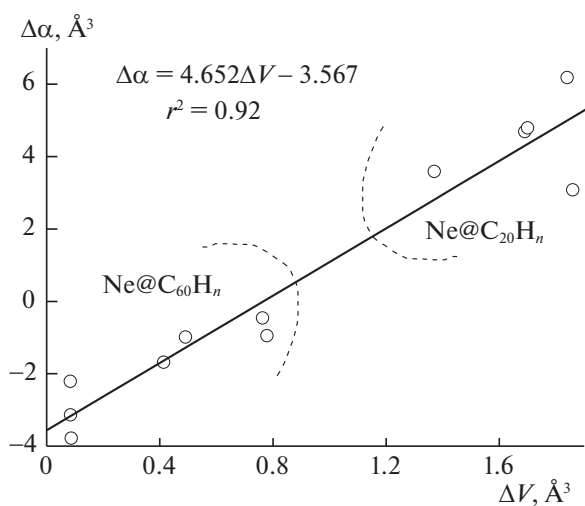


Рис. 7. Зависимость депрессии/экзальтации поляризуемости гидрированных эндофуллеренов от изменения объема углеродного каркаса при инкапсулировании.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Соколов В.И., Станкевич И.В. // Успехи химии. 1993. Т. 62. С. 455.
2. Osuna S., Swart M., Solà M. // Chem.-Eur. J. 2009. V. 15. P. 13111.
3. Weiske T., Wong T., Krätschmer W. et al. // Angew. Chem. Int. Ed. 1992. V. 31. P. 183.
4. Kleiser R., Sprang H., Furrer S., Campbell E.E.B. // Z. für Phys. At. Mol. Clust. 1993. V. 28. P. 89.
5. Saunders M., Cross R.J., Jimenez-Vazquez H.A. et al. // Science. 1996. V. 271. P. 1693.
6. Cioslowski J., Fleischmann E.D. // J. Chem. Phys. 1991. V. 94. P. 3730.
7. Левин А.А., Бреславская Н.Н. // Изв. АН. Сер. хим. 2005. № 9. С. 1939.
8. Wang Z.-Y., Su K.-H., Yao X.-P. et al. // Mater. Chem. Phys. 2010. V. 119. P. 406.
9. Yan H., Yu S., Wang X. et al. // Chem. Phys. Lett. 2008. V. 456. P. 223.
10. Сабиров Д.Ш., Булгаков Р.Г. // Письма в ЖЭТФ. 2010. Т. 92. С. 730.
11. Marenich A.V., Cramer C.J., Truhlar D.G. // Chem. Sci. 2013. V. 4. P. 2349.
12. Сабиров Д.Ш., Малинов Е.С., Шенелевич И.С., Булгаков Р.Г. // Вестн. Башкирск. ун-та. 2012. Т. 15. № 4. С. 1127.
13. Murry R.L., Scuseria G.E. // Science. 1994. V. 263. P. 791.
14. Patchkovskii S., Thiel W. // J. Am. Chem. Soc. 1996. V. 118. P. 7164.
15. Sabirov D.Sh., Terentyev A.O., Sokolov V.I. // RSC Adv. 2016. V. 6. P. 72230.
16. Delaney P., Greer J.C. // Appl. Phys. Lett. 2004. V. 84. P. 431.
17. Reis H., Loboda O., Avramopoulos A. et al. // J. Comput. Chem. 2011. V. 32. P. 908.
18. Srivastava A.K., Pandey S.K., Misra N. // Mater. Chem. Phys. 2016. V. 177. P. 437.

жет быть оценена по изменению объема при инкапсулировании.

Работа выполнена в рамках НИОКТР ИНК УФИЦ РАН “Разработка новых теоретических подходов и программного обеспечения для моделирования сложных химических процессов и поиска соединений с заданными физико-химическими свойствами” (регистрационный номер: АААА-А19-119022290011-6) при частичной финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (код проекта № 19-03-00716).

19. *Li S., Tang C., Zhang X.* // *Comput. Theor. Chem.* 2016. V. 1084. P. 17.
20. *Sabirov D.Sh., Terentyev A.O., Shepelevich I.S., Bulgakov R.G.* // *Comput. Theor. Chem.* 2014. V. 1045. P. 86.
21. *Sabirov D.Sh.* // *J. Phys. Chem. C.* 2013. V. 117. P. 1178.
22. *Sabirov D.Sh., Tukhbatullina A.A., Bulgakov R.G.* // *Fullerene Nanotube Carbon Nanostruct.* 2015. V. 23. P. 835.
23. *Сабиров Д.Ш., Гарипова Р.Р., Хасанов А.Р., Булгаков Р.Г.* // *Вестн. Башкирск. ун-та.* 2011. Т. 16. № 1. С. 16.
24. *Galano A., Pérez-González A., delOlmo L. et al.* // *J. Mol. Model.* 2014. V. 20. P. 2412.
25. *Сабиров Д.Ш., Терентьев А.О., Булгаков Р.Г.* // *Вестн. Башкирск. ун-та.* 2013. Т. 18. № 4. С. 1006.
26. *Морозкин Н.Д., Тухбатуллина А.А., Сабиров Д.Ш.* // Там же. 2018. Т. 23. № 4. С. 1105.
27. *Бреславская Н.Н., Левин А.А., Бучаченко А.Л.* // *Изв. АН. Сер. хим.* 2004. № 1. С. 19.
28. *Стариков А.Г., Гапуренко О.А., Бучаченко А.Л. и др.* // *Рос. хим. журн.* 2007. Т. 51. № 5. С. 107.
29. *Blair S.A., Thakkar A.J.* // *J. Chem. Phys.* 2014. V. 141. P. 074306.
30. *Blair S.A., Thakkar A.J.* // *Chem. Phys. Lett.* 2014. V. 610–611. P. 163.
31. *Adams G.B., O'Keeffe M., Ruoff R.S.* // *J. Phys. Chem.* 1994. V. 98. P. 9465.
32. *Sabirov D.Sh., Zakirova A.D., Tukhbatullina A.A. et al.* // *RSC Adv.* 2013. V. 3. P. 1818.
33. *Лайков Д.Н., Устынюк Ю.А.* // *Изв. АН. Сер. хим.* 2005. № 3. С. 804.
34. *Sabirov D.Sh.* // *RSC Adv.* 2014. V. 4. P. 44996.
35. *Sabirov D.Sh., Bulgakov R.G., Khursan S.L.* // *ARKIVOC.* 2011. № 8. P. 200.
36. *Зверев В.В., Коваленко В.И.* // *Журн. физ. химии.* 2006. № 1. С. 110.
37. *Шестаков А.Ф.* // *Рос. хим. журн.* 2007. Т. 51. № 5. С. 121.
38. *Pankratyev E.Yu., Tulyabaev A.R., Khalilov L.M.* // *J. Comput. Chem.* 2011. V. 32. P. 1993.
39. *Tulyabaev A.R., Khalilov L.M.* // *Comput. Theor. Chem.* 2011. V. 976. P. 12.
40. *Шестаков А.Ф.* // *Изв. АН. Сер. хим.* 2016. № 10. С. 2340.
41. *Sabirov D.Sh., Ōsawa E.* // *J. Chem. Inf. Model.* 2015. V. 55. P. 1576.
42. *Pankratyev E.Yu., Khatymov R.V., Sabirov D.Sh., Yuldashev A.V.* // *Physica E.* 2018. V. 101. P. 265.
43. *Верецагин А.Н.* *Поляризуемость молекул.* М.: Наука, 1980. 170 с.
44. *Emsley J.* *The Elements.* Oxford: Oxford University Press, 1998. 200 p.
45. *Buchachenko A.L.* // *J. Phys. Chem. B.* 2001. V. 105. P. 5839.
46. *Boltalina O.V., Bühl M., Khong A. et al.* // *J. Chem. Soc. Perkin Trans. 2.* 1999. № 7. P. 1475.