

ЗАКОНОМЕРНОСТИ СОПРЯЖЕНИЯ p -ЭЛЕКТРОНОВ
В ЦИЛИНДРИЧЕСКИХ УГЛЕРОДНЫХ МОЛЕКУЛАХ© 2022 г. О. Б. Томилин^а, Е. Е. Мурюмин^а, Е. В. Родионова^{а,*}, Л. В. Фомина^а^аМордовский государственный университет им. Н.П. Огарева, Саранск, Россия

*e-mail: Rodionova_j87@mail.ru

Поступила в редакцию 01.09.2021 г.

После доработки 03.11.2021 г.

Принята к публикации 20.01.2022 г.

Исследованы закономерности сопряжения p -электронов в углеродных наноструктурах цилиндрического строения. Показано, что непланарность углеродного остова позволяет образовывать сопряженную систему p -электронов, отличающуюся от сопряженной системы с π -электронным сопряжением; принципиальное отличие возникающего *in-plane*-электронного сопряжения – образование узловой нижней связывающей молекулярной орбитали. Установлено, что взаимодействие p -электронов в молекулах с непланарным углеродным остовом продуцирует вакантные молекулярные орбитали со специфической локализацией электронной плотности, способные участвовать в процессах, генерируемых внешними физическими полями. С использованием метода Хартри–Фока в базе 3-21G и метода DFTB3LYP в базе 6-31G показано, что в углеродных нанокольцах с 4-, 5-, и 6-членными конденсированными циклами реализуется *in-plane*-электронное сопряжение p -электронов, величина которого уменьшается с уменьшением размерности углеродных многоугольников.

Ключевые слова: сопряжение p -электронов, углеродные нанотрубки, углеродные нанокольца, призманы

DOI: 10.31857/S0044453722070329

Последние десятилетия ознаменовались открытиями различных углеродных наноструктур с сопряженными системами C–C-связей – фуллеренов, нанотрубок, наноколец, наноканусов, призманои и т.д. В настоящее время становятся популярными методы синтеза этих углеродных нанобъектов “в колбе”, которые позволяют получать наноструктуры заданного строения практически без примесей. Однако, зачастую уникальные физико-химические свойства полученных наноструктур оказываются неожиданными для исследователей. Причина проявления подобных свойств – изменение свойств сопряженной системы p -электронов обсуждаемых наноструктур.

Обсуждая изменения свойств сопряженной системы p -электронов в неплоских сопряженных молекулах, необходимо помнить, что непланарность углеродного остова может иметь два следствия. Во-первых, реализуется фрагментация сопряженной системы на подсистемы с сохранением ориентации p -атомных орбиталей, обеспечивающей π -электронное сопряжение. Во-вторых, реализуется новая ориентация p -атомных орбиталей относительно углеродного остова. Эти две принципиальные ориентации p -атомных орбиталей продемонстрированы на рис. 1.

Различие в представленных на рис. 1 видах сопряжения заключается не только в величине интегралов перекрывания атомных орбиталей. Образующиеся сопряженные системы p -электронов принципиально различаются по структуре образующихся молекулярных орбиталей (МО). Если нижняя связывающая МО π -сопряженной системы безузловая, то нижняя связывающая МО циклической системы с p - или *in-plane*-электронным

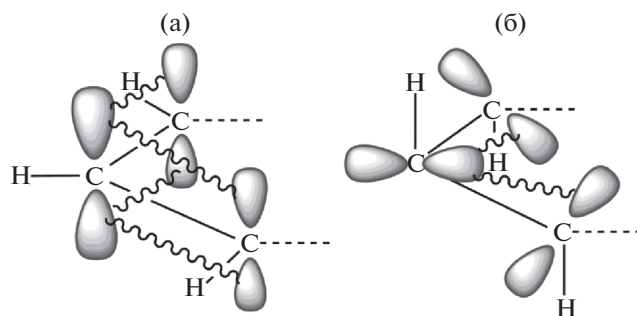


Рис. 1. Принципиальные случаи ориентации p -атомных орбиталей относительно циклического углеродного остова: а – π -электронное сопряжение, б – p - или *in-plane*-электронное сопряжение.

сопряжением имеет два узла инверсии знака в базе атомных волновых функций. Это обстоятельство открывает возможность появления МО со специфическим распределением электронной плотности на атомах углеродного остова в области вакантных молекулярных орбиталей. Принципиально новая структура МО образующейся сопряженной системы электронов представляет собой основу для появления новых физико-химических свойств, особенно при внешних физических воздействиях на углеродные наноструктуры.

Так, например, свойствами указанных выше МО сопряженной системы p -электронов можно объяснить закономерности холодной полевой эмиссии электронов из углеродных нанотрубок в постоянном электрическом поле, имеющей значимую прикладную ценность [1]. Этими свойствами, по-видимому, можно интерпретировать появление в электронных спектрах поглощения траннуленов специфического пика в длинноволновой области электромагнитного спектра, который свидетельствует о существовании квазистабильного возбужденного состояния [2].

Безусловно, тот или иной вид ориентации p -атомных орбиталей относительно углеродного остова связан с пространственной структурой молекулы. Это убедительно показано на примерах призматических и антипризматических модификаций модельных одностенных углеродных нанотрубок (ОСУНТ) [3, 4].

Так, характеристики энергетического спектра призматических модификаций ОСУНТ близки энергетическим спектрам соответствующих линейных углеводородных молекул, остов которых аналогичен образующимся углеродным трекам в гранях модифицированных ОСУНТ. При антипризматической модификации ОСУНТ углеродные треки имеют неплоские винтовые структуры. Поэтому характеристики энергетического спектра антипризматических модификаций существенно отличаются от энергетических спектров соответствующих линейных углеводородных молекул.

Обсудим, в каких свойствах электронной структуры молекул и как проявляется новый вид сопряжения p -электронов — *in-plane*-электронное сопряжение. Молекулярными углеводородными аналогами углеродных структурных единиц, образующих ОСУНТ ($n,0$) и ОСУНТ (n,n), являются циклические all *транс*-аннулены (траннулены) C_NH_N и all *цис*-аннулены C_NH_N (рис. 2), которые могут быть объектами исследования закономерностей сопряжения в ОСУНТ. Выбор указанных модельных молекул обусловлен предложенной в [5] гипотезой о двойной ароматичности в 3,5-дегидрофенил катионе, которая далее была развита в концепции *in-plane*-электронного сопряжения [6]. Сходная концепция, отличаю-

щаяся ориентацией представления p -орбиталей на криволинейных поверхностях углеродных остовов была предложена в [7, 8], и сопряжение между такими орбиталями названо p -электронным сопряжением [7].

В [9–11] показано, что зависимость величины ΔE — энергетической щели между верхней занятой и нижней вакантной МО от числа двойных связей r ($r = N/2$) в траннуленах имеет вид асимптотически затухающих осцилляций, причем максимумы амплитуды осцилляций соответствуют нечетным r . В *цис*-аннуленах, а также в *цис*- и *транс*-полиенах величина ΔE асимптотически монотонно убывает с увеличением r [11]. Отмеченная особенность поведения величины ΔE может служить индикатором вида реализуемого сопряжения p -электронов.

Следует также отметить, что принципиальное различие *in-plane*-электронного сопряжения и p -электронного сопряжения заключается в повышенной концентрации электронной плотности внутри кольца (внутри нанотрубки) и повышенной концентрации электронной плотности вне кольца (внешней стороны нанотрубки).

Цель настоящей работы — исследование трансформации закономерностей сопряжения p -электронов в углеродных структурных единицах ОСУНТ ($n,0$) и ОСУНТ (n,n) в характеристики сопряженной системы углеродных нанотрубок в целом, а также возможности реализации нового вида сопряжения p -электронов в цилиндрических молекулах с иным строением углеродного остова.

ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНАЯ ЧАСТЬ

Модель и метод исследования

Рассмотрим характеристики сопряженных систем ультракоротких модельных молекул, которые иллюстрируют пошаговый процесс образования ОСУНТ ($n,0$) и ОСУНТ (n,n) конечной протяженности из соответствующих углеродных структурных единиц. Модельные молекулы, образующие ОСУНТ ($n,0$) и ОСУНТ (n,n) можно представить двумя способами. Во-первых, в виде системы взаимодействующих циклических *транс*- и *цис*-углеродных цепочек l_i , соответственно. Во-вторых, в виде линейных *транс*- и *цис*-углеродных цепочек l_i , располагающихся на цилиндрической поверхности нанотрубки, параллельно ее оси. Примеры модельных молекул, соответствующие двум рассмотренным способам образования ОСУНТ ($n,0$) и ОСУНТ (n,n), показаны на рис. 2.

Число цепочек l_i в модельных системах определяется параметром s . Для первого класса модельных систем $s = 1, 2, \dots, 12$. Для второго класса модельных молекул в случае ОСУНТ ($n,0$) вели-

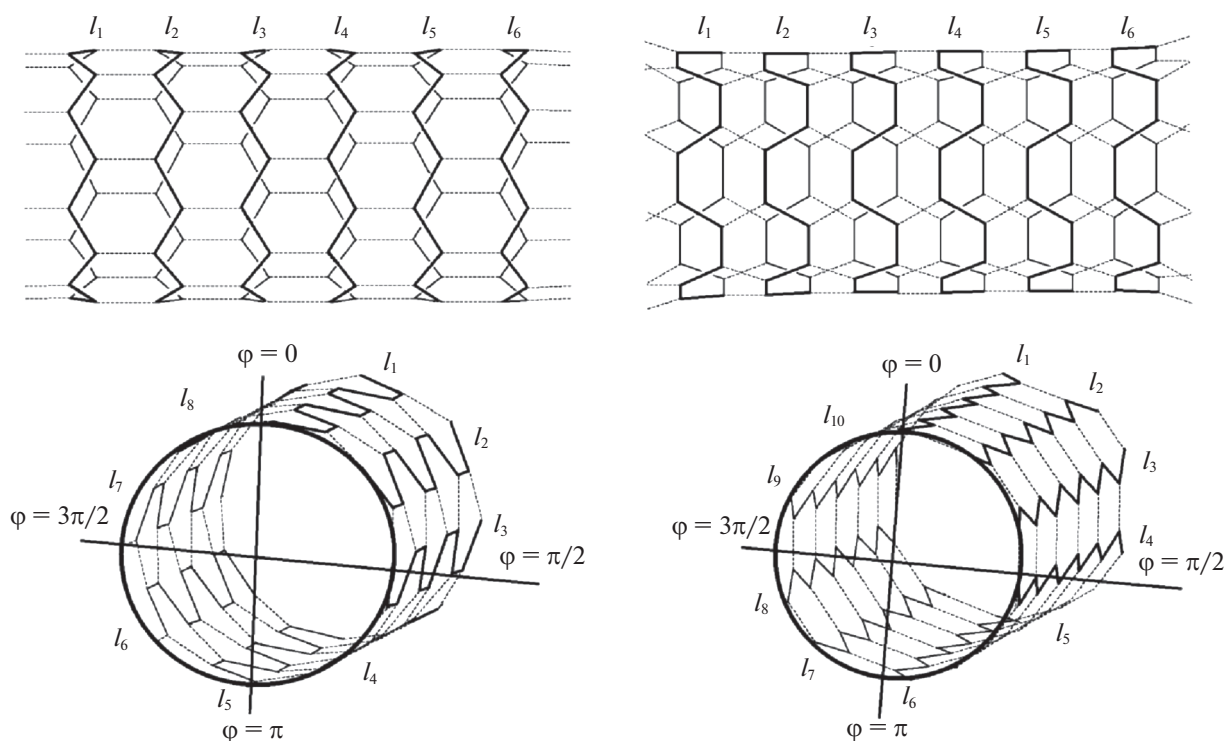


Рис. 2. Структуры модельных молекул, образованные взаимодействующими *транс*- и *цис*-углеродными цепочками.

чина $s = 1, 2, \dots, n$, для молекул, моделирующих ОСУНТ (n, n) величина $s = 1, 2, \dots, 2n$. Индекс хиральности n принимает значения для ОСУНТ ($n, 0$) $n = 5-9$ и для ОСУНТ (n, n) — $n = 3-7$. Свободные валентности атомов углерода в модельных молекулах насыщались атомами водорода. Атомы водорода располагались на цилиндрической поверхности модельных систем, длина связи С–Н принималась равной 1.07 Å.

Для решения поставленной задачи исследования следующие зависимости:

– для модельных молекул, как систем взаимодействующих замкнутых *транс*- и *цис*-углеродных цепочек, зависимости ΔE от индекса хиральности n при фиксированных значениях s ;

– для модельных молекул, как систем взаимодействующих линейных *транс*- и *цис*-углеродных цепочек, зависимости ΔE от индекса хиральности n при фиксированных значениях угла φ . Угол φ представляет собой угол сектора поперечного сечения ОСУНТ, в который попадают взаимодействующие линейные *транс*- и *цис*-углеродные цепочки (рис. 2). Угол φ принимал значения $\varphi = 0, \pi/2, \pi, 3\pi/2, 2\pi$.

Расчет электронного строения модельных молекул обоих классов проводился неэмпирическим методом Хартри–Фока в базе 3-21G из пакета прикладных программ Firefly [12] при фиксированной геометрии их углеродного каркаса, взятого из оптимизированной геометрии фраг-

ментов ОСУНТ соответствующего вида и индекса хиральности. Предварительно для некоторых модельных молекул расчет проводился методом DFT-B3LYP в базе 6-31G. Сравнение результатов, полученных обоими методами, показало их качественное совпадение при незначительном количественном различии. С учетом этого обстоятельства расчеты всех модельных молекул, рассмотренных в настоящей работе, проводились менее затратным методом Хартри–Фока в базе 3-21G.

Однако, между атомами *all транс*- и *all цис*-аннуленов могут быть иные, чем в ОСУНТ, ковалентные взаимодействия, реализация которых, обеспечивает иной порядок связывания атомов углерода в молекулах. Углеродный остов таких молекул представляет собой цилиндрические поверхности из тетрагонов и пентагонов. Нанокольца с покрытием боковой поверхности тетрагонами представляют собой $[m]$ призмы [13]. Величина $m = 5, \dots, 9$ определяет число вершин в углеродных циклах $(\text{CH})_m$, уложенных параллельными слоями в молекуле призмы. Построение нанокольца из конденсированных пятичленных углеродных циклов с образованием цилиндрического остова возможно, если в качестве повторяющегося фрагмента использовать пентален. Всякие связи насыщались атомами водорода. Число n пенталеновых фрагментов принимало значения $n = 4, 5, \dots, 10$. Расчеты электронной структуры

углеродных наноконеч с 4-, 5- и 6-членными конденсированными циклами проводились методом DFT-B3LYP в базе 6-31G из пакета прикладных программ Firefly [12].

ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ

Чтобы исключить влияние возможных локальных состояний, для достижения цели настоящей работы величина ΔE вычислялась как разность энергий верхней занятой и нижней вакантной МО, которые обеспечивают локализацию электронной плотности по всему углеродному остову. На рис. 3 представлены зависимости ΔE для ОСУНТ ($n,0$) от индекса хиральности n и числа циклических *транс*-углеродных цепочек s . Как видно из данных рис. 3, для модельных молекул из циклических *транс*-углеродных цепочек $s = 1-4$ наблюдаются осцилляции величины ΔE с увеличением n , причем максимумы амплитуд осцилляций достигаются при нечетных значениях n , а минимумы – при четных значениях n , за исключением $s = 3$. Такое поведение величин ΔE в зависимости от n совпадает с поведением ΔE в зависимости от числа двойных С=С-связей в трансуленах C_NH_N с *in-plane*-электронным сопряжением. В линейных *all транс*- и *all цис*-сопряженных углеводородных молекул наблюдается монотонное уменьшение величины ΔE с увеличением числа двойных С=С-связей [10, 11]. Таким образом, в рассмотренных модельных молекулах, в основном, реализуется *in-plane*-электронное сопряжение *p*-электронов атомов углерода.

При увеличении числа циклических *транс*-углеродных цепочек в модельных молекулах при $s = 4-6$ происходит трансформация осциллирующего поведения величины ΔE в зависимости от индекса хиральности n . Дальнейшее увеличение числа циклических *транс*-углеродных цепочек при $s \geq 6$ изменяет характер осцилляций величин ΔE от индекса хиральности n , приводя его к затухающим осцилляциям с минимумами амплитуды при $n = 3k$ ($k = 1, 2, 3, \dots$), что соответствует результатам для ОСУНТ ($n,0$) [14–16].

Полученные результаты могут иметь следующую интерпретацию. ОСУНТ ($n,0$) можно рассматривать так же, как систему взаимодействующих линейных углеродных *цис*-цепочек l_i , располагающихся на поверхности нанотрубки вдоль ее цилиндрической оси. Каждая из таких цепочек будет представлять собой систему с сопряжением, близким к π -электронному. Увеличение числа циклических *транс*-углеродных цепочек в модельных молекулах приводит к увеличению протяженности образующихся линейных углеродных систем с π -электронным сопряжением. Как уже отмечалось выше, для подобных систем характерно монотонное асимптотическое уменьшение ве-

личин ΔE с увеличением числа двойных С=С-связей.

Таким образом, в сопряженной системе ОСУНТ ($n,0$) реализуются два фактора, действующих на электронную структуру молекул и определяющих, в конечном итоге, поведение величины ΔE в зависимости от индекса хиральности n : поперечный фактор – генерирующее осциллирующее поведение величины ΔE благодаря *in-plane*-электронному сопряжению и продольный фактор – растягивающий осциллирующие характеристики ΔE вследствие π -электронного сопряжения.

На рис. 3 также представлены зависимости ΔE для модельных молекул ОСУНТ (n,n) от индекса хиральности n и числа циклических *цис*-углеродных цепочек s . Как видно из рис. 3, для всех рассмотренных модельных молекул наблюдается монотонное изменение величины ΔE с увеличением индекса хиральности n , причем в большинстве случаев (кроме $s = 2$ и 3) зависимость ΔE от n имеет убывающий характер, аналогичный зависимости величины ΔE от числа двойных С=С-связей в циклических *цис*-полиенах C_NH_N [11]. Таким образом, представленное выше поведение ΔE связано с *in-plane*-электронным сопряжением в циклических *цис*-углеродных цепочках, образующих ОСУНТ (n,n).

Рассматривая ОСУНТ (n,n), как систему взаимодействующих линейных *транс*-углеродных цепочек, располагающихся на цилиндрической поверхности параллельно цилиндрической оси нанотрубки, можно отметить, что каждая из таких цепочек будет представлять собой систему с сопряжением, близким к π -электронному. Для подобных систем характерным является монотонное асимптотическое уменьшение величин ΔE с увеличением числа двойных С–С-связей. Таким образом, в сопряженной системе ОСУНТ (n,n) реализуются два фактора, действующих на электронную структуру рассматриваемых углеродных нанотрубок, а именно: поперечный фактор – *in-plane*-электронное сопряжение и продольный фактор – π -электронное сопряжение, оказывающие одинаковое влияние на поведение величины ΔE в зависимости от индекса хиральности n , которое соответствует характеру проводимости в ОСУНТ (n,n).

Исследование изменения свойств сопряженной системы в цилиндрических углеродных молекулах можно также рассмотреть при пошаговом формировании фрагментов углеродных нанотрубок из иных структурных элементов – линейных *транс*- и *цис*-углеродных цепочек (см. рис. 2). На рис. 3 представлены зависимости ΔE для модельных молекул ОСУНТ ($n,0$) от индекса хиральности n и числа линейных *цис*-углеродных цепочек s . Характеристики модельных молекул, представ-

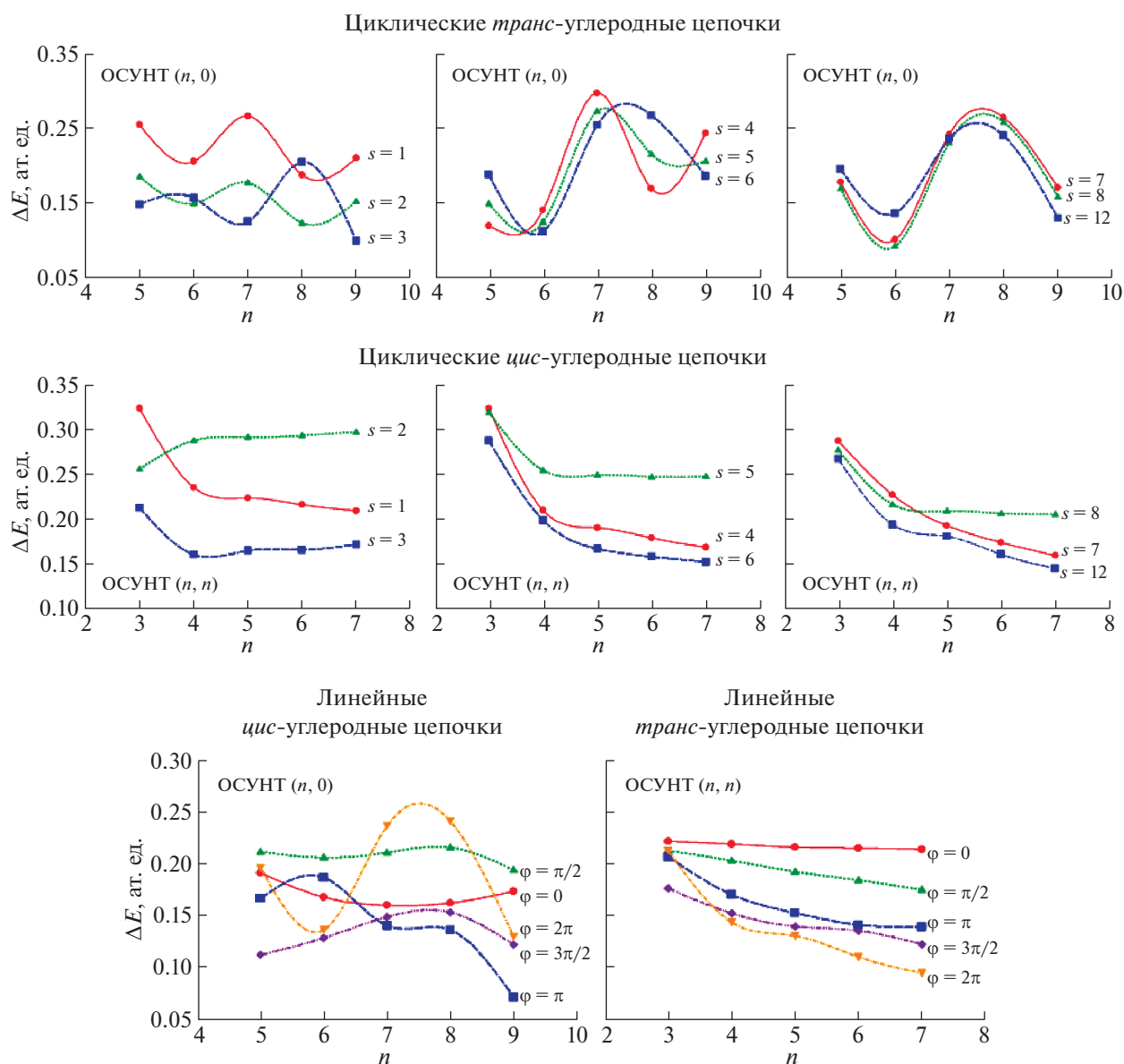


Рис. 3. Зависимости величины энергетической щели ΔE в модельных молекулах с различным числом *транс*- и *цис*-углеродных цепочек от индекса хиральности n образующей ОСУНТ.

ляющих собой взаимодействующие линейные *цис*-углеродные цепочки, будем связывать с углом φ сектора поперечного сечения ОСУНТ, в который попадают модельные молекулы (см. рис. 3). Увеличение угла φ будет характеризовать увеличение вклада *in-plane*-электронного сопряжения при сохранении π -электронного сопряжения цепочек l_i .

Как видно из рис. 3, для $\varphi = 0$ (модельные молекулы для любого из рассматриваемых n состоят из одной линейной *цис*-углеродной цепочки) характер изменения ΔE от n соответствует сопряженной системе с π -электронным сопряжением. Для $\varphi = \pi/2$ в зависимости ΔE от n появляются

крайне слабые осцилляции, характерные для ОСУНТ $(n,0)$. При $\varphi = \pi$ дальнейшее пошаговое увеличение модельных молекул для любого из рассматриваемых n приводит к увеличению вклада *in-plane*-электронного сопряжения. Влияние поперечного фактора порождает осцилляции в зависимости ΔE от n в рассмотренном интервале изменения индекса хиральности. Однако, заметим, что максимум амплитуд осцилляций ΔE от n достигается при четных n . Относительное увеличение вклада π -электронного сопряжения нарастает при $\varphi = 3\pi/2$ и достигает своего завершения при $\varphi = 2\pi$, когда минимумы амплитуд осцилляций ΔE от n достигаются при $n = 3k$ ($k = 1, 2, 3, \dots$).

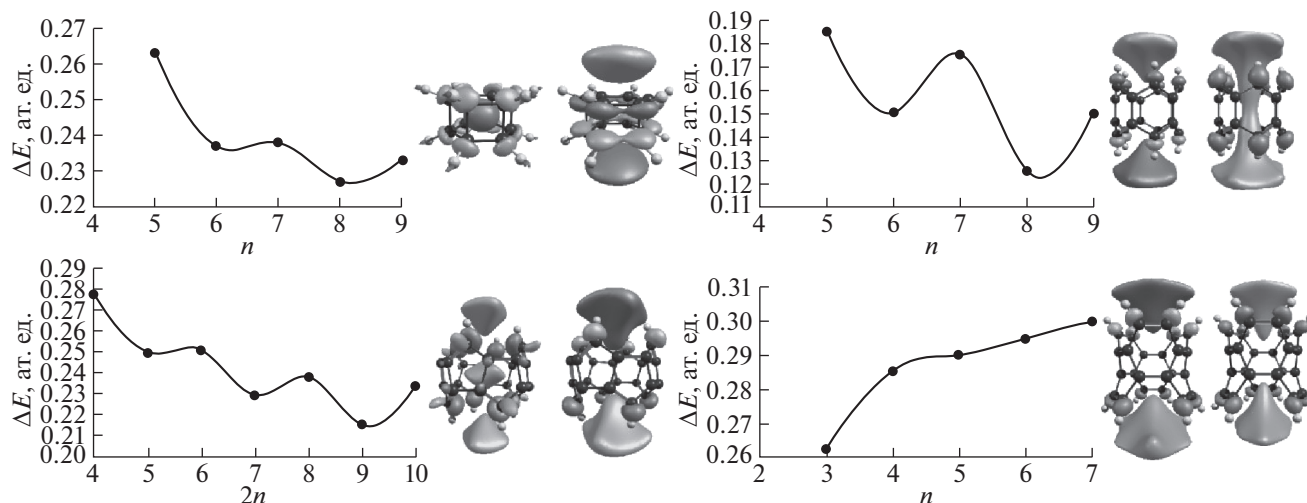


Рис. 4. Зависимости величины ΔE от числа углеродных многоугольников n в нанокольцах и структура вакантной молекулярной орбитали со специфической локализацией электронной плотности.

На рис. 3 также представлены зависимости ΔE модельных молекул для ОСУНТ (n, n) от индекса хиральности n и числа линейных *транс*-углеродных цепочек s (рис. 2). Как видно из рис. 3, для всех рассмотренных значений секторального угла φ и индекса хиральности n наблюдается, в основном, монотонное асимптотическое уменьшение величины ΔE с ростом n . Данный результат также можно интерпретировать, как совместное одинаковое воздействие на сопряженную систему расщепляемых фрагментов ОСУНТ (n, n) поперечного фактора – *in-plane*-электронного сопряжения и продольного фактора – π -электронного сопряжения.

Резюмируя изложенное выше, можно отметить следующее. Итоговые свойства сопряженной системы ОСУНТ определяются соотношениями пространственной протяженности углеродных фрагментов, в которых реализуется *in-plane*- и π -электронное сопряжение. Молекулами, в которых максимально представлено *in-plane*- и π -электронное сопряжение, являются *all транс*- и *all цис*-аннулены, а также углеродные кольца из отмеченных двух ковалентно взаимодействующих углеродных цепочек, образующих углеродные гексагоны. Стабилизация взаимодействия *in-plane*- и π -электронных сопряжений достигается в цилиндрических молекулах с числом замкнутых *транс*- и *all цис*-углеродных цепочек $s \geq 6$. Это обстоятельство означает, что ультракороткие углеродные нанотрубки с числом гексагонов, равным 6 и более, достаточно хорошо описывают основные закономерности сопряженной системы p -электронов ОСУНТ.

Исследование нанокольц из конденсированных пятичленных углеродных циклов с образованием цилиндрического остова показывает, что

зависимости ΔE от n имеют осциллирующий характер (рис. 4). Максимумы амплитуд достигаются в отличие от ранее рассмотренных нанокольц из углеродных гексагонов при четных n . По-видимому, это связано с представлением повторяющегося фрагмента в виде сдвоенных циклов. Кроме того, отметим, что величина амплитуды осцилляций ΔE меньше, чем в циклаценах. Также наблюдается образование МО со специфической локализацией электронной плотности, энергии которой несколько больше энергии нижней вакантной орбитали (LUMO) (рис. 4).

При исследовании поверхности потенциальной энергии (ППЭ) модельных $[m]$ призматов обнаружены минимумы, соответствующие $m = 5-9$, причем величины энергии атомизации молекул на один атом углерода составляют 0.398, 0.397, 0.394, 0.390, 0.386 ат. ед., соответственно. Представленные данные свидетельствуют об уменьшении относительной стабильности рассмотренных призматов с увеличением m . Полученные результаты соответствуют экспериментальным и теоретическим данным [17–20], которые сообщают о существовании $[m]$ призматов, где $m = 3, 4, 5$.

Анализ полученных результатов показывает, что зависимость величины ΔE от m имеет осциллирующий характер (рис. 4). Максимумы амплитуды осцилляций в призмах достигаются, как и в нанокольцах из гексагонов, при нечетных значениях m . Однако, амплитуды осцилляций существенно меньше, что может свидетельствовать о меньшей реализации – *in-plane*-электронного сопряжения.

Представленные результаты показывают, что призматы, содержащие четырехкоординированный углерод, тем не менее демонстрируют свойства молекул с *in-plane*-электронным сопряжением

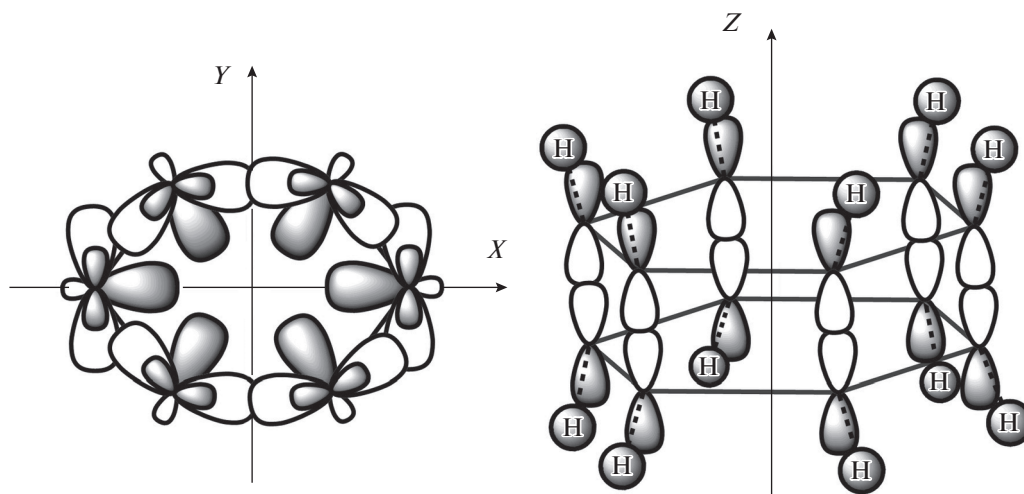


Рис. 5. Ориентация p -атомных орбиталей и sp^2 -гибридизованных атомных орбиталей в $[m]$ призмах.

p -электронов. Чтобы интерпретировать полученные результаты, по-иному представим образование связей в призмах, исходя из sp^2 -гибридизации атома углерода. Как видно из рис. 5, две из гибридных атомных орбиталей участвуют в образовании С–С-связей, третья атомная орбиталь участвует в образовании сопряженной системы с *in-plane*-электронным сопряжением. В этом случае объединение колец в призме осуществляется благодаря трехцентровым (Н–С–С) двухэлектронным связям, ориентированным по оси Z .

На рис. 4 представлено строение двух практически вырожденных нижних вакантных молекулярных орбиталей призм. Видно, что представленные МО имеют специфическую локализацию электронной плотности на атомах остова: как в торцевых плоскостях нанокольца, так и в центре призмы.

Предположение о характере электронного связывания в молекулах призм подтверждается данными о длине экваториальных и аксиальных С–С-связей. Длины экваториальных С–С-связей выровнены и изменяются в интервале 1.57–1.58 Å, что соответствует одинарным или несколько удлинённым одинарным связям. Длины аксиальных С–С-связей несколько превышают экваториальные и составляют 1.57–1.59 Å. Кроме того, наиболее стабильная молекула [5]призма имеет три валентных угла с вершиной в атоме С, близких к 120° . В [6]призме только две связи, образуемых атомом С, составляют угол $\approx 120^\circ$. В целом, наблюдается тенденция увеличения отклонения валентных углов от 120° с ростом диаметра призмы, что соответствует экспериментальным данным о стабильности рассматриваемых молекул.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Анализ полученных результатов позволяет сделать следующие выводы. В нанокольцах из конденсированных углеродных тетра-, пента- и гексагонов реализуется новый вид сопряжения p -электронов – *in-plane*-электронное сопряжение, обладающее стабилизирующим действием. Характерным индикатором *in-plane*-электронного сопряжения являются осцилляции величины энергетической щели ΔE при четных и нечетных значениях числа углеродных многоугольников нанокольца. Величина амплитуды осцилляции ΔE может служить оценкой меры реализации *in-plane*-электронного сопряжения, которая уменьшается в ряду нанокольц, образованных гексагонами, пентагонами, тетрагонами.

Кроме того, другой характерный индикатор *in-plane*-электронного сопряжения – появление среди вакантных молекулярных орбиталей со специфической локализацией электронной плотности в торцевых плоскостях нанокольц. В призмах такая молекулярная орбиталь – нижняя вакантная МО. Увеличение размерности углеродных многоугольников нанокольца смещает МО со специфической локализацией электронной плотности в вакантные состояния с большей энергией. Энергия молекулярной орбитали со специфической локализацией электронной плотности существенно меньше зависит от диаметра нанокольца, чем остальные МО молекулы, хотя, по-видимому, более чувствительны к внешним воздействиям.

С увеличением линейной протяженности нанокольца в направлении его цилиндрической оси электронные характеристики образующихся молекул обуславливаются взаимодействием *in-plane*-электронного сопряжения и π -электронного сопряжения. Результат совместного действия

реализуется в стабильных электронных характеристиках цилиндрических сопряженных углеродных молекул протяженностью шесть гексагонов вдоль цилиндрической оси.

Выражаем глубокую благодарность профессору А.В. Князеву за участие в обсуждении полученных результатов.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Томилин О.Б., Родионова Е.В., Родин Е.А.* // Журн. физ. химии. 2020. Т. 94. № 8. С. 1242.
2. *Хакина Е.А., Перегудов А.С., Троянов С.И. и др.* // Изв. АН, Сер. хим. 2012. Т. 61. № 2. С. 264.
3. *Tomilin O.B., Muryumin E.E., Rodionova E.V. et al.* // Appl. Surf. Sci. 2018. V. 428. P. 171.
4. *Томилин О.Б., Мuryumin Е.Е., Родионова Е.В.* // ФТТ. 2013. Т. 55. № 11. С. 2276.
5. *Chandrasekhar J., Jemmis E.D., Schleyer P.v.R.* // Tetrahedron Lett. 1979. V. 39. P. 3707.
6. *Schleyer P.v.R., Jiao H., Glukhovtsev M.N. et al.* // J. Am. Chem. Soc. 1994. V. 116. P. 10129.
7. *Бочвар Д.А., Гальперн Е.Г.* // Докл. АН СССР. 1973. Т. 209. С. 610.
8. *Schmalz T.G., Seitz W.A., Klein D.J. et al.* // Chem. Phys. Lett. 1986. V. 130. P. 203.
9. *Fokin A.A., Jiao H., Schleyer P.v.R.* // J. Am. Chem. Soc. 1998. V. 120. P. 9364.
10. *Herges R.* // Chem. Rev. 2006. V. 106. P. 4820.
11. *Tomilin O.B., Stankevich I.V., Muryumin E.E. et al.* // Carbon. 2012. V. 50. P. 5217.
12. *Schmidt M.W., Baldrige K.K., Boatz J.A. et al.* // J. Comput. Chem. 1993. V. 14. P. 1347.
13. *Minyaev R.M., Minkin V.I., Gribanova T.N. et al.* // J. Org. Chem. 2003. V. 68. P. 8588.
14. *Zolyomi V., Kúrti J.* // Phys. Rev. B. 2004. V. 70. P. 085403.
15. *Gülseren O., Yildirim T., Ciraci S.* // Phys. Rev. B. 2002. V. 65. P. 153405.
16. *Kleiner A., Eggert S.* // Phys. Rev. B. 2001. V. 64. P. 113402.
17. *Katz T.J., Acton N.* // J. Am. Chem. Soc. 1973. V. 95. P. 2738.
18. *Eaton P.E., Cole T.W.* // J. Am. Chem. Soc. 1964. V. 86. P. 3157.
19. *Eaton P.E., Or Y.S., Branca S.J.* // J. Am. Chem. Soc. 1981. V. 103. P. 2134.
20. *Маслов М.М., Подливаев А.И., Опенов Л.А.* // ФТТ. 2011. Т. 53. С. 2403.