**Мазалева, Ольга Николаевна.**

## Каркасные преобразования высших фуллеренов в условиях хлорирования : диссертация ... кандидата физико-математических наук : 02.00.04 / Мазалева Ольга Николаевна; [Место защиты: Моск. гос. ун-т им. М.В. Ломоносова]. - Москва, 2018. - 106 с. : ил.

## Оглавление диссертациикандидат наук Мазалева, Ольга Николаевна

Оглавление

Стр.

Глава 1. Номенклатура фуллеренов и фуллерены с

необычными углеродными каркасами

1.1 Правило изолированных пятиугольников

1.2 Номенклатура фуллеренов

1.3 Понятие о простейших каркасных превращениях фуллеренов

1.4 Получение производных non-IPR-фуллеренов при синтезе из графита

1.5 Неклассические фуллерены

1.6 Первые примеры каркасных преобразований фуллеренов в условиях хлорирования

1.6.1 Превращение ^2-19150Сто в С2-18917СтбС124

1.6.2 Превращение ™-С8-63758С86 в неклассический С84С132

1.7 Способы трансформации углеродного каркаса в условиях хлорирования

Глава 2. Особенности квантово-химического моделирования

процессов с участием фуллеренов

2.1 Расчет энергий изомеров

2.2 Особенности моделирования процессов каркасных преобразований

Глава 3. Структурные преобразования фуллеренов с

сохранением числа атомов углерода в каркасе

3.1 Превращение ^2-19150Стб в С2-18917СтбС124

3.2 Превращение та-С2-39712С82 в non-IPR-39173C82Cl28

Глава 4. Структурные преобразования фуллеренов с

изменением числа атомов углерода в каркасе

4.1 Окислительное элиминирование

4.1.1 Превращение ^-С^63758С86 в С84С132

4.1.2 Элиминирование фрагмента С2 из /ь-С60

Стр.

4.1.3 Элиминирование фрагмента С2 в С8-С70 (СРз)8

4.1.4 Оценка применимости различных теоретических подходов к рассмотрению окислительного

элиминирования

4.2 Превращение Сд0 в С88С122/24

4.3 Превращение Сш(19) в попЛРН-283794^^, Сд8(^С2)С12б и ПОП-1РК-185115С9бС128

4.4 Другие случаи каркасных преобразований

Заключение

Выводы

Список литературы