

РАСЧЁТЫ ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИХ СВОЙСТВ ГИДРИДОВ ФУЛЛЕРЕНОВ $C_{60}H_y$ В СОСТОЯНИИ ИДЕАЛЬНОГО ГАЗА

Карпушенкова Л. С., Дикий В. В., Павлечко Е. В., Кабо Г. Я.
Белорусский государственный университет,
г. Минск, Беларусь, kabo@bsu.by

Измерения термодинамических свойств гидридов фуллеренов существенно ограничены вследствие трудностей получения чистых образцов. Нами рассчитаны термодинамические свойства изомеров гидридов фуллеренов $C_{60}H_y$, где $y = 1, 2 \dots 30$, в интервале 298,15... 1500 К.

Расчет энтальпий образования $C_{60}H^y$ выполнен квантово-химическими методами с использованием базиса MP2/6-31G*, верифицированного по результатам вычислений $A_{\text{с#}}$ клеточных углеводородов, и гомодесмической реакции [1]



Моменты инерции молекул $C_{60}H^y$ вычислены по структурным параметрам молекул из квантовохимических расчетов. Частоты нормальных колебаний рассчитаны с использованием базиса 6-31G* и методом силового поля [2].

По результатам расчета определены термодинамические параметры реакций гидрирования фуллерена C_{60} при разных степенях гидрирования и различном изомерном составе гидридов.

Литература:

1. Дикий В. В., Жура Л. С., Кабо Г. Я. Теоретическое исследование термодинамических свойств полиэдренов // Выбранные научные работы БГУ. У 7 т. Т. 5. Хімія. - Мн.: Белдзяржуніверсітэт, 2001. - Ст. 401-425.
2. Грибов Л. А., Дементьев В. А. Методы и алгоритмы вычислений в теории колебательных спектров молекул. - М., 1981.