

УДК 539.54.512.1

## [C<sub>60</sub>]-ФУЛЛЕРЕН. ПОДСЧЕТ И СИСТЕМАТИЗАЦИЯ ИЗОМЕРОВ ЗАМЕЩЕНИЯ ПО ВЕРШИНАМ, РЕБЕРАМ И ГРАНЯМ

В.М. Смоляков, Д.В. Соколов, Д.Ю. Нилов, В.В. Гребешков

Тверской государственный университет, 170002, Россия, Тверь, Садовый пер., 35  
smolyakov@inbox.ru

**Аннотация:** В работе обсуждаются изомеры замещения по вершинам, ребрам и граням [C<sub>60</sub>]-фуллерена. Дан вывод изомеров на основе теоремы Пойа. Установлены формулы симметрии  $Z$ , производящие функции для определения числа хиральных и ахиральных изомеров замещения, распределения изомеров по семействам  $\rho(m)$  и в зависимости от числа  $m$  мест замещения. По аддитивной схеме проведен расчет термодинамических свойств ( $\Delta_f H^\circ_{298}$ ,  $S^\circ_{298}$ ,  $C^\circ_{p298}$ ,  $\Delta H$  субл,  $\Delta_f G^\circ_{298}$ ,  $\lg K_{298}$ ) газообразных [C<sub>60</sub>] - [C<sub>100</sub>] - фуллеренов.

**Ключевые слова:** фуллерены, подсчет и систематизация изомеров замещения, элементы и операции симметрии, производящие функции, хиральность, ахиральность.

### 1. Введение

В настоящее время химия фуллеренов находится под пристальным вниманием исследователей [1-17]. В направлении синтеза полимеров на основе фуллеренов достигнуты обнадеживающие результаты. Особого внимания заслуживают полимеры на основе C<sub>60</sub>. Молекулы C<sub>60</sub> служат при этом сотовой полимерной цепи, а их соединение осуществляется с помощью бензолных колец [1]. Не исключается и пока не реализованный вариант, когда молекулы C<sub>60</sub> играют роль соединительного элемента [1]. Успешно осуществлен [2] синтез металлоорганических полимеров типа (C<sub>60</sub>Pd)<sub>n</sub>, (C<sub>60</sub>Pd<sub>2</sub>)<sub>n</sub> и (C<sub>60</sub>Pd<sub>3</sub>)<sub>n</sub>. В [3, 4] объектом для исследования были выбраны фторпроизводные, а в [5] – бромпроизводные фуллерены. Большой практический интерес к получению [C<sub>60</sub>F<sub>36</sub>] и [C<sub>60</sub>F<sub>44</sub>] фуллеренов [3, 4] связан с перспективой создания соединения, которое аналогично тефлону и может стать основой смазочного материала с уникальными свойствами. На основе C<sub>60</sub>, C<sub>70</sub> и других фуллеренов наряду с линейной структурой, очевидно, могут быть синтезированы двумерные и трехмерные структуры с необходимыми для практики физико-химическими свойствами. Одной из проблем химии фуллеренов является создание водорастворимых нетоксичных соединений фуллеренов, которые могли бы вводиться в организм человека с целью положительного терапевтического действия. Важнейшая задача исследования биологически активных соединений фуллеренов – выяснение закономерностей накопления фуллереновых соединений в органах и тканях (эффективные лекарственные препараты).

## 2. Методика перечисления изомеров замещения молекул и кристаллов

Для перечисления изомеров замещения по методу Пойа [6] группа симметрии  $G$  исходного полиэдра (точечная группа) предполагается известной. При последовательном выполнении всех возможных, операций симметрии происходит обмен мест возможного замещения. Эти обмены образуют циклы (в математическом смысле), обозначаемые соответствующими цикловыми индексами операций симметрии  $f_l^\alpha, f_m^\beta, \dots$ , где  $a, b, \dots$  – число циклов соответственно порядка  $l, m, \dots$  – порядок цикла (т.е. число вершин, участвующих в циклическом обмене).

С помощью подстановок вида

$$f_l^\alpha = (h^l + x^l + y^l + \dots)^\alpha, \quad f_m^\beta = (h^m + x^m + y^m + \dots)^\beta \dots \quad (1)$$

формула симметрии или цикловой индекс группы [8]

$$Z_G = \frac{1}{|G|} \sum_{g \in G} f_l^\alpha(g) f_m^\beta(g) \dots, \quad (2)$$

(здесь  $|G|$  – порядок группы) преобразуется в производящую функцию

$$h^v + Ah^{v-1}x + Bh^{v-2}x^2 + \dots \quad (3)$$

коэффициенты  $(1, A, B, \dots)$ , в которой равны числу изомеров замещения типа  $h^a x^b y^c$  – и могут быть вычислены из соотношения для полиномиальных коэффициентов.

## 3. $[C_{60}]$ -фуллерен

Фуллерены – кластеры, в которых каждое пятиугольное кольцо окружено пятью шестиугольными кольцами и нет точек соприкосновения пятиугольных колец между собой (правило «изолированных пятиугольников»). Сфера фуллерена  $C_n$  должна содержать  $(n+4)/2$  колец (из которых 12 пятиугольных и  $n/2 - 10$  шестиугольных) и  $3n/2$  ребер, из которых  $(3n-120)/2$  – инцидентны только шестиугольным кольцам. В молекуле  $C_{60}$  каждый атом расположен в вершине многогранника, инцидентной одной пятиугольной и двум шестиугольным граням, и принципиально неотличим от других атомов углерода (см. рис. 1).

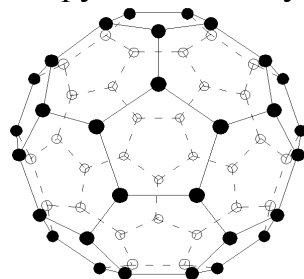


Рис. 1. Структуры молекул  $[C_{60}]$  – фуллеренов.

#### 4. Вершинное замещение молекулы $[C_{60}]$ -фуллерепа

Полная группа симметрии молекулы  $C_{60} - I_h$ :  $6S_{10}$ ,  $6C_5$ ,  $10S_6$ ,  $10C_3$ ,  $15\sigma$ ,  $15C_2$ ,  $i$ . Операциям симметрии молекулы  $[C_{60}]$ -фуллерепа соответствуют цикловые индексы:  $E \Rightarrow f_1^{60}$ ,  $6S_{10}^1 \Rightarrow f_{10}^6$ ,  $6S_{10}^3 \Rightarrow f_{10}^6$ ,  $6S_{10}^7 \Rightarrow f_{10}^6$ ,  $6S_{10}^9 \Rightarrow f_{10}^6$ ,  $6C_5^1 \Rightarrow f_5^{12}$ ,  $6C_5^2 \Rightarrow f_5^{12}$ ,  $6C_5^3 \Rightarrow f_5^{12}$ ,  $6C_5^4 \Rightarrow f_5^{12}$ ,  $10S_6^1 \Rightarrow f_6^{10}$ ,  $10S_6^5 \Rightarrow f_6^{10}$ ,  $10C_3^1 \Rightarrow f_3^{20}$ ,  $10C_3^2 \Rightarrow f_3^{20}$ ,  $15\sigma \Rightarrow f_1^4 f_2^{28}$ ,  $15C_2^1 \Rightarrow f_2^{30}$ ,  $S_2^1 \Rightarrow f_2^{30}$  и формула симметрии

$$Z_1^V = 1/120(f_1^{60} + 16f_2^{30} + 15f_1^4 f_2^{28} + 20f_3^{20} + 20f_6^{10} + 24f_5^{12} + 24f_{10}^6) \quad (4)$$

для определения числа изомеров (см. Таблицу 1) замещения  $[C_{60}]$ -фуллеренов без учета свойств хиральности. Для группы вращений  $I$  (при этом операции зеркального отражения  $\sigma_h, \sigma_v, \sigma_d$ , центр инверсии  $I$  и зеркально-поворотная ось  $S_n$  исключаются) цикловой индексу или формула симметрии, отвечающая полному числу хиральных и ахиральных изомеров (см. Таблицу 1)  $[C_{60}]$ -фуллерепа, запишется в виде

$$Z_2^V = 1/60(f_1^{60} + 15f_2^{30} + 20f_3^{20} + 24f_5^{12}). \quad (5)$$

Числа хиральных и ахиральных изомеров (см. Таблицу 1) связаны между собой соотношениями:

$$N_{ch} = 2N(Z_2^V) - 2N(Z_1^V); \quad N^{ach} = 2N(Z_1^V) - N(Z_2^V). \quad (6)$$

Таблица 1. Числа изомеров  $XYZ$  – замещённых молекулы  $[C_{60}]$ -фуллерепа, вычисленные по формулам (4) и (5)

Семейство	Число изомеров			
	$Z_1$	$Z_2$	Хиральные	Ахиральные
$C^{58}X^1Y^1$	31	59	56	3
$C^{57}X^2Y^1$	871	1711	1680	31
$C^{57}X^1Y^1Z^1$	17141	3422	3416	6
$C^{56}X^3Y^1$	16297	32509	32424	85
$C^{56}X^2Y^2$	24635	48981	48692	289
$C^{56}X^2Y^1Z^1$	48807	97527	97440	87
$C^{55}X^4Y^1$	227794	455126	454664	462
$C^{55}X^3Y^2$	455560	910252	909384	868
$C^{55}X^3Y^1Z^1$	910336	1820504	1820336	168
$C^{55}X^2Y^2Z^1$	1365840	2730756	2729832	924
...	...	...	...	...

По числу возможных изомеров замещённые  $[C_{60}]$ -фуллерены распадаются на 966467 семейств (Неупорядоченное разбиение числа 60 на целые положительные слагаемые. Здесь и далее  $C^n$  соответствует  $n$  незамещённым атомам углерода.):  $C^{60}$ ,  $C^{59}X$ ,  $C^{58}X^2$ ,  $C^{58}XY$ ,  $C^{57}X^3$ , ...

$C^{52}X^5Y^2Z$ , ..., содержащих соответственно 1, 1, 23, 31, 303, ..., 3562084870, ... изомеров.

Количество  $r$  - разбиений числа 60 на  $k$  целых положительных частей ( $k = 1, 2, 3, 4, \dots, 12, \dots, 18, \dots, 24, \dots, 58, 59, 60$ ) с одинаковым числом слагаемых (разбиений одного ранга) соответственно равно  $r = 1, 30, 300, 1575, \dots, 74287, \dots, 47420, \dots, 17782, \dots, 2, 1, 1$ . Так, суммарное число изомеров  $X$  - замещённых ( $k=2, r=30$ )  $[C_{60}]$ -фуллерена равно 9607679885289312, а суммарное число изомеров  $XU$  - замещённых ( $k=3, r=300$ ) - 353259652293727442874919719 и т.д.

С использованием (4) и соответствующей производящей функции (3) можно получить перечисляющий ряд, коэффициенты в котором есть числа изомеров определенных типов. Например, для  $X$ -замещённых  $C^{60}$  - фуллерена имеем:

$$\begin{aligned} \Phi' = & 1 + X^1 + 23X^2 + 303X^3 + 4190X^4 + 45718X^5 + 864332935668892X^{28} + \\ & + 953746664302456X^{29} + 985538239868528X^{30} + \dots + 45718X^{55} + 4190X^{56} + \\ & + 303X^{57} + 23X^{58} + X^{59} + X^{60}. \end{aligned}$$

## 5. Реберное замещение молекулы $[C_{60}]$ -фуллерена

а) При замещении по ребру, вершинам которого инцидентны два пятиугольника и два шестиугольника, цикловые индексы для определения числа изомеров (см. Таблицу 2) без учета и с учетом энантиомерии соответственно имеют вид

$$Z^E_1 = 1/120(f_1^{30} + f_2^{15} + 15f_1^2 f_2^{14} + 15f_1^4 f_2^{13} + 20f_3^{10} + 20f_6^5 + 24f_5^6 + 24f_{10}^3), \quad (7)$$

$$Z^E_2 = 1/60(f_1^{30} + 15f_1^2 f_2^{14} + 20f_3^{10} + 24f_5^6). \quad (8)$$

б) Замещение по ребрам пятиугольников эквивалентно замещению по вершинам (см. (4) и (5)). Согласно (4)-(8), для подсчета числа изомеров замещения по всем 90 ребрам цикловые индексы запишутся как

$$Z^E_1 = 1/120(f_1^{90} + f_2^{45} + 15f_1^2 f_2^{44} + 15f_1^8 f_2^{41} + 20f_3^{30} + 20f_6^{15} + 24f_5^{18} + 24f_{10}^9), \quad (9)$$

$$Z^E_2 = 1/60(f_1^{90} + 15f_1^2 f_2^{44} + 20f_3^{30} + 24f_5^{18}). \quad (10)$$

Таблица 2. Числа изомеров реберного замещения молекулы  $[C_{60}]$ -фуллерена, вычисленные по формулам (7) и (8)

Семейство	Число изомеров		Семейство	Число изомеров	
	$Z_1$	$Z_2$		$Z_1$	$Z_2$
$C^{30}$	1	1	$C^{22}X^8$	49270	97890
$C^{29}X^1$	1	1	$C^{21}X^9$	1199971	238993
$C^{28}X^2$	8	11	$C^{20}X^{10}$	251512	501507
$C^{27}X^3$	46	78	$C^{19}X^{11}$	4567291	911456

Продолжение Таблицы 2

Семейство	Число изомеров		Семейство	Число изомеров	
	$Z_1$	$Z_2$		$Z_1$	$Z_2$
$C^{26}X^4$	262	483	$C^{18}X^{12}$	722750	1442875
$C^{25}X^5$	1257	2423	$C^{17}X^{13}$	1000251	1997499
$C^{24}X^6$	5113	10025	$C^{16}X^{14}$	1214376	2425320
$C^{23}X^7$	17238	34112	$C^{15}X^{15}$	1295266	2587100

## 6. Замещение молекулы $[C_{60}]$ –фуллерена по граням

а) Замещению по пятиугольным граням соответствуют индексы

$$Z^F_1 = l/120(f_1^{12} + 16f_2^6 + 15f_1^4 f_2^4 + 20f_3^4 + 20f_6^2 + 24f_1^2 f_5^2 + 24f_2^1 f_1), \quad (11)$$

$$Z^F_2 = l/60(f_1^{12} + 15f_2^6 + 20f_3^4 + 24f_1^2 f_5^2) \quad (12)$$

равные цикловым индексам  $Z^V_1$  и  $Z^V_2$  при вершинном замещении икосаэдра.

б) Замещению по шестиугольным граням соответствуют индексы

$$Z^F_1 = l/120(f_1^{20} + 16f_2^{10} + 15f_1^4 f_2^8 + 20f_1^2 f_3^6 + 20f_2^1 f_6^3 + 24f_5^4 + 24f_{10}^2), \quad (13)$$

$$Z^F_2 = l/60(f_1^{20} + 15f_2^{10} + 20f_1^2 f_3^6 + 24f_5^4) \quad (14)$$

равные цикловым индексам  $Z^V_1$ , и  $Z^V_2$  при вершинах замещения пентагонального додекаэдра.

На рис. 2 показаны все дизамещенные (ахиральные и хиральные) фторпроизводные  $[C_{60}]$ –фуллерена. Их распределение по точечным группам симметрии (по Шёнфлису) соответственно следующее: 1, 2 и 4 – 7 относятся к группе  $C_s$ ; изомеры 3 и 8 – к  $C_{2v}$ ; 9 изомер – к  $C_{2h}$ ; изомеры 10, 11, 13, 14, 17, 18, 19 и 21 относятся к точечной группе  $C_1$ , а 12, 15, 16, 20, 22 и 23 – к  $C_2$ .

## 7. Расчет термодинамических свойств углеродных кластеров $C_{60} - C_{100}$

Метод основан на прогнозировании свойств для рядов изомеров замещения с похожей структурой на основе разбиения многоугольных чисел треугольника Паскаля [7].

Численные расчеты  $\Delta_f H^\circ_{298}$ ,  $S^\circ_{298}$ ,  $C^\circ_{p298}$ ,  $\Delta H_{\text{субл}}$ ,  $\Delta_f G^\circ_{298}$ ,  $\lg K_{298}$  газообразных  $[C_{60}]$ – $[C_{100}]$ -фуллеренов проведены по аддитивной схеме [9] (см. Таблицу 3)

$$P_{\text{Fulleren}} = n_C x_0 + n_{C_6} x_2 + n_{\text{edge}} x_3 + n_F x_4, \quad (15)$$

где  $n_C$  и  $n_{\text{edge}}$  – число углеродных атомов и связей  $C-C$  в кластере;  $n_{C_6}$  – число шестичленных циклов;  $n_F$  – общее число пяти- и шестичленных

циклов, а  $x_0, x_2, x_3, x_4$  – параметры схемы, определенные МНК по опытными величинам В.П. Колесова и С.М Пименовой (МГУ) [18-22], а также В.В. Дикого и Г.Я. Кабо (БелГУ).

Таблица 3. Расчет по (15) термодинамических свойств углеродных кластеров  $C_{60} - C_{100}$

Фуллерен	$\Delta_f H^\circ_{298}$	$\Delta_f G^\circ_{298}$	$\Delta H_{\text{субл}}$	$S^\circ_{298}$	$C^\circ_{p298}$	$lgK_{298}$
	кДж/моль			Дж/моль К		
$C_{60}$	2530	2474,5	183,7	543,9	498,5	-433,52
$C_{68}$	2710	2648,34	196,98	599,9	567,78	-463,98
$C_{70}$	2755	2691,8	200,3	613,9	585,1	-471,59
$C_{72}$	2800	2735,26	203,62	627,9	602,42	-479,21
$C_{74}$	2845	2778,72	206,94	641,9	619,74	-486,82
$C_{76}$	2890	2822,18	210,26	655,9	637,06	-494,43
$C_{78}$	2935	2865,64	213,58	669,9	654,38	-502,05
$C_{80}$	2980	2909,1	216,9	683,9	671,7	-509,66
$C_{84}$	3070	2996,02	223,54	711,9	706,34	-524,89
$C_{90}$	3205	3126,4	233,5	753,9	758,3	-547,73
$C_{100}$	3430	3343,7	250,1	823,9	844,9	-585,80

## 8. Заключение

Кристаллические группы могут описывать симметрию позиции, такую симметрию окружения той или иной точки кристаллического пространства, в частности симметрию позиции атома (или молекулы) в кристаллической структуре. Так как грани кристалла являются узловыми сетками, в его габитусе (внешней огранке) находит непосредственное выражение симметрия кристаллической решетки. Поскольку ребра кристалла – узловые ряды, используют  $Z$  реберного замещения. Разные по своему геометрическому смыслу точечные группы изоморфны (например,  $D_{3h}$ ,  $D_{3d}$ ,  $D_6$ ). Обратное, структура параллелепедра не определяется однозначно формулой симметрии  $Z$ . Генерация изомеров реберных и граневых замещений  $[C_{60}]$  и  $[C_{100}]$  – фуллеренов выполнена нами с целью получения из этих фуллеренов других многогранников, симметрия которых еще не известна. Представленные комбинаторные методы могут быть полезны при построении математических моделей прогнозирования физико-химических свойств производных фуллеренов и фуллеритов на основе разбиения многоугольных чисел треугольника Паскаля [7, 21] и на основе коэффициентов характеристических полиномов матрицы смежности их молекулярных графов [22].

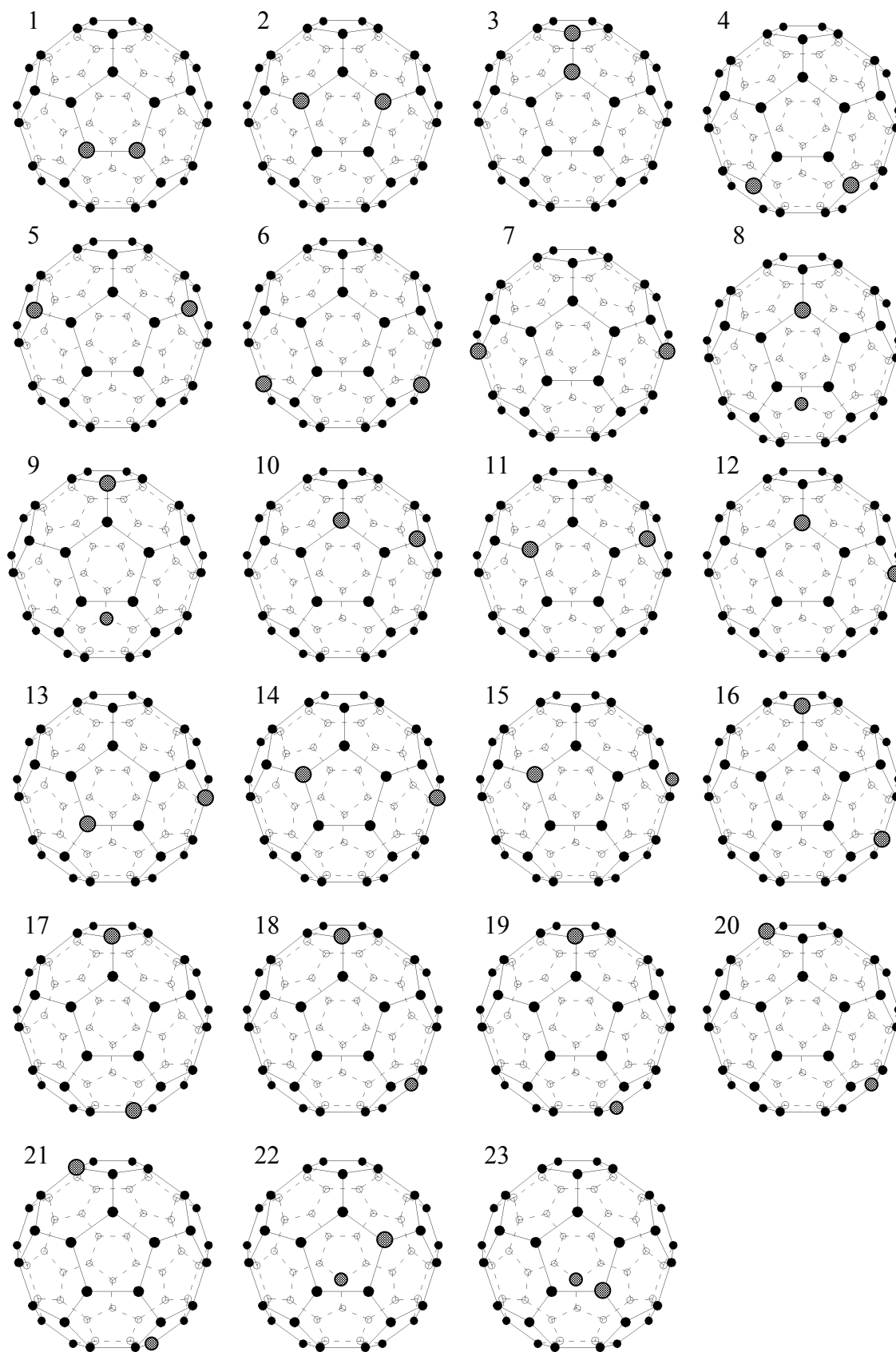


Рис. 2. Фториды фуллерена  $C_{60}$  (изомеры экзоэдрального замещения). 1-9 – ахиральные изомеры, 10-23 – хиральные.

### Библиографический список:

1. **Wudl, F.** The chemical properties of buckminsterfullerene ( $C_{60}$ ) and the birth and infancy of fullerooids / F. Wudl // *Accounts of Chemical Research*. – 1992. – V. 25. – I. 3. – P. 157-161.
2. **Lindoy, L.F.**  $C_{60}$  chemistry expands / L.F. Lindoy // *Nature*. – 1992. – V. 357. – P. 443-444.
3. **Selig, H.** Fluorinated fullerenes / H. Selig, C. Lifshitz, T. Peres et al. // *Journal of the American Chemical Society*. – 1991. – V. 113. – I. 14 – P. 5475-5476.
4. **Fischer, J.E.** Solid-state chemistry of fullerene-based materials / J.E. Fischer, P.A. Heiney, A.B. Smith // *Accounts of Chemical Research*. – 1992. – V. 25. – I. 3. – P. 112-118.
5. **Birkett P.R.** Preparation and characterization of  $C_{60}Br_6$  and  $C_{60}Br_8$  / Birkett P.R., Hitchcock P.B., Kroto H.W., Taylor R., Walton D.R.M. // *Nature*. – 1992. – V. 357 (6378) – P. 479-481.
6. **Пойа, Дж.** Комбинаторные вычисления для групп, графов и химических соединений / Дж. Пойа; пер. с англ. в кн.: Перечислительные задачи комбинаторного анализа / под ред. В.П. Гаврилова. – М.: Мир, 1979. – С. 36-138.
7. **Смоляков, В.М.** Расчетные методы в физической химии / В.М. Смоляков // Межвузовский тематический сборник научных трудов. – Калинин: КГУ, 1988. – С. 39-68.
8. **Смоляков, В.М.** [ $C_{60}$ ] и [ $C_{70}$ ]-фуллерены: формулы симметрии для генерирования экзоэдральных изомеров замещения / В.М. Смоляков, Д.В. Соколов, Д.Ю. Нилов // IV Международная научная конференция по математическому моделированию: труды конференции, Москва (27 июня - 1 июля 2000 года). – М.: МГТУ «Станкин», 2000. – Т. II. – С. 238-242.
9. **Смоляков В.М.** Генерация изомеров экзоэдрального замещения фуллера [  $C_{60}$  ] / Смоляков В.М., Соколов Д.В., Нилов Д.Ю. // VIII Международная научная конференция «Химия твердого тела и современные микро- и нанотехнологии»: тезисы докладов, Кисловодск (14-19 сентября 2008 года). – Кисловодск, 2008. – С. 287-289.
10. **Смоляков, В.М.** [ $C_{60}$ ]- [ $C_{100}$ ] – фуллерены: генерация изомеров замещения на основе вершинной, реберной и граневой дифференциации / В.М. Смоляков, Д.В. Соколов, Д.Ю. Нилов, Д.М. Федин // Перспективные материалы. – 2008. – Специальный выпуск № 6. – Часть I. – С. 173-180.
11. **Смоляков, В.М.** [ $C_{76}$ ]-Фуллерены: перечисление изомеров замещения на основе вершинной, реберной и граневой дифференциации / В.М. Смоляков, Д.В. Соколов, Д.Ю. Нилов, В.В. Гребешков // XI Международная конференция «Водородное материаловедение и химия углеродных наноматериалов»: тезисы докладов, Ялта, Украина (25-31 августа 2009). – Ялта, 2009. – С. 462-465.
12. **Смоляков, В.М.** [ $C_{60}$ ] – [ $C_{80}$ ] – фуллерены: перечисление изомеров замещения и методы расчета термодинамических свойств. Часть I / В.М. Смоляков, Д.В. Соколов, Д.Ю. Нилов, В.В. Гребешков, Д.М. Федин // X Китайско-Российский Симпозиум «Новые материалы и технологии»: Журнал «Rare materials and technology. Volume 28», Дзясинь, Китай (20-30 октября 2009 года). – Дзясинь, Китай, 2009. – С. 626-629.
13. **Смоляков, В.М.** [ $C_{60}$ ] – [ $C_{80}$ ] – фуллерены: перечисление изомеров замещения и методы расчета термодинамических свойств. Часть II / В.М. Смоляков, Д.В. Соколов,



Д.Ю. Нилов, В.В. Гребешков, Д.М. Федин // X Китайско-Российский Симпозиум «Новые материалы и технологии»: Журнал «Rare materials and technology. Volume 28», Дзясинь, Китай (20-30 октября 2009 года). – Дзясинь, Китай, 2009. – С. 630-636.

14. **Smolyakov, V.M.** [ $C_{72}$ ] – fullerene: enumeration of substitution isomers based on the vertex, edge and facial differentiation / V.M. Smolyakov, D.V. Sokolov, D.Yu. Nilov, V.V. Grebeshkov, V.V. Bolshakov // XXIX Workshop on Geometrical Methods in Physics: conference proceedings, Białowieza, Poland. 27 June–3 July 2010. – New York: American Institute of Physics, 2010. – P. 163-167.

15. **Smolyakov, V.M.** [ $C_{76}$ ] – fullerene: enumeration of substitution isomers based on the vertex, edge and facial differentiation / V.M. Smolyakov, D.V. Sokolov, D.Yu. Nilov, V.V. Grebeshkov, D.M. Fedin // Carbon Nanomaterials in Clean Energy Hydrogen Systems – II. NATO Science for Peace and Security Series C: Environmental Security. – 2011. – V. 2. – P. 381-388.

16. **Смоляков, В.М.** Карбометаллические производные борводородов и  $C\{2H\}D\{5d\}$ : перечисление изомеров замещения / В.М. Смоляков, Д.Ю. Нилов, Д.В. Соколов, В.В. Гребешков // Журнал физической химии. – 2012. – Т. 86. – № 2. – С. 316-322.

17. **Смоляков, В.М.** Карбометаллические производные борводородов  $C_{1v}$  и  $C_{5v}$ : перечисление и идентификация изомеров замещения и схема расчета свойств  $C_{5v}$  на основе чисел треугольника / В.М. Смоляков, Д.В. Соколов, Д.Ю. Нилов, В.В. Гребешков // Журнал структурной химии. – 2013. – Т. 54. – № 1. – С. 57-65.

18. **Meier, M.S.** Efficient preparative separation of  $C_{60}$  and  $C_{70}$ . Gel permeation chromatography of fullerenes using 100% toluene as mobile phase / M.S. Meier, V.P. Selegue // The Journal of Organic Chemistry. – 1992. – V. 57. – I. 6. – P. 1924.

19. **Kolesov, V.P.** Enthalpies of combustion and formation of fullerene  $C_{60}$  / V.P. Kolesov, S.M. Pimenova, V.K. Pavlovich et al. // The Journal of Chemical Thermodynamics. – 1996. – V. 28. – I. 10. – P. 1121-1125.

20. **Пименова С.М.** Об энтальпии образования фуллерена  $C_{70}$  / Пименова С.М., Колесов В.П., Волков Ю.А., Давыдов В.Я., Тамм Н.Б., Мельханова С.В. // Журнал физической химии. – 1997. – Т. 71. – № 11 – С. 1937-1941.

21. **Нилов, Д.Ю.** Построение графовых моделей расчета свойств изомеров замещения базисных структур на основе аддитивности энергетических вкладов / Д.Ю. Нилов, В.М. Смоляков // Журнал физической химии. – 2012. – Т. 86. – № 5. – С. 819-825.

22. **Смоляков, В.М.** Термохимические расчеты: учебное пособие / В.М. Смоляков, Ю.Г. Папулов, В.П. Левин. – Тверь: Изд-во ТвГУ, 1991. – 78 с.