

# Tetraéderes szimmetriával rendelkező nem-IPR fullerének DFT tanulmányozása

## DFT study of non-IPR tetrahedral fullerenes

NAGY Katalin, NAGY Levente Csaba

Babeş-Bolyai Tudományegyetem, Kémia és Vegyészmérnöki Kar,  
Kolozsvár, Arany János u., 11, RO-400028, Románia  
levente.nagy@ubbcluj.ro

### ABSTRACT

Fullerenes that do not obey the isolated pentagon rule (IPR) are highly reactive and have only been synthesized as either endohedral or exohedral derivatives, and up to date no pure-carbon cages have been found that violate the IPR rule. The local strain in fullerenes attributed to fused pentagons, can be relieved by replacing the reactive carbon atoms with nitrogen heteroatoms, or by changing the hybridization state through hydrogen addition. In this study the electronic and structural properties of the ten smallest carbon cages with tetrahedral symmetry were investigated by means of density functional theory. The impact of nitrogen doping and exohedral hydrogenation at the four reactive sites was also examined. Both the global and the local ring aromaticity of the clusters were estimated using the nucleus independent chemical shift (NICS) index. As a measure of the distortion from planarity of the  $sp^2$  hybridized carbon atoms the pyramidalization angle was predicted by the POAV theory. Computational results indicate that stability improves as the energetically unfavorable strain is relieved.

**Keywords:** tetrahedral fullerenes, DFT, aromaticity, strain energy

### ÖSSZEFOGLALÓ

Az izolált ötszög szabályt (IPR) nem követő fullerének rendkívül reakcióképesek, és csak endohedrális vagy exohedrális származékaikat sikerült előállítani. Jelenleg nem léteznek olyan tisztán szén klaszterek, amelyek megszegnék az IPR szabályt. A fullerénekben az érintkező ötszögeknek tulajdonítható lokális feszültség enyhíthető, ha a reaktív szénatomokat nitrogén heteroatomokkal helyettesítik, vagy ha a hibridizációs állapotot hidrogén addícióval megváltoztatják. Ezen tanulmányban a tíz legkisebb, tetraéderes szimmetriával rendelkező szénketrec elektronikus és szerkezeti tulajdonságait vizsgáltuk sűrűségfüggő elmélet segítségével. A négy reaktív helyen megvalósított nitrogén atommal történő dopolás valamint az exohedrális hidrogénezés hatása volt elemezve. A klaszterek globális és lokális gyűrűs aromás jellegének a becslése a magfüggetlen kémiai eltolódás (NICS) értékek meghatározásával történt. Az  $sp^2$  hibridizált szénatomok síkból való elhajlásának mértéke a POAV elmélet alapján számolt piramidalizációs szög segítségével volt meghatározva. A számítási eredmények azt mutatják, hogy a stabilitás javul a szerkezet torzulásából adódó, energetikailag kedvezőtlen, feszültség enyhítésével.

**Kulcsszavak:** tetraéderes szimmetriájú fullerén, DFT, aromás jelleg, torziós energia