**Электронные свойства аклилпроизводных трифторметилфуллеренов
*C*s- и *С*2-C70(CF3)8**

***Кольман-Иванов Э.В.***

*Студент, 6 курс специалитета*

*Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова,
химический факультет, Москва, Россия*

*E-mail:* *erny.kivo@gmail.com*

В настоящее время производные фуллеренов широко применяют в органической электронике для создания светодиодов, сенсоров, фотовольтаических устройств с объемным гетеропереходом, а также в качестве электронопроводящего слоя в перовскитных солнечных батареях [1]. Обширное семейство трифторметилфуллеренов, благодаря химической и термической устойчивости, ярко выраженным электроноакцепторным свойствам, а также возможности получения в препаративных количествах, вызывает большой интерес для применения в устройствах органической электроники [2]. Однако, несмотря на разнообразие уже синтезированных представителей семейства трифторметилфуллеренов, разработка методов направленной функционализации, позволяющей тонко настраивать их электронные свойства и растворимость для получения новых практически применимых соединений, является актуальной и востребованной задачей.

В настоящей работе показана возможность региоселективного гидрирования, а также алкилирования изомеров С70(CF3)8. Привлечение квантово-химических расчетов методом теории функционала плотности позволило предложить региоселективный путь функционализации трифторметилфуллеренов. Использование в качестве прекурсора генерируемых *in situ* анионов С70(CF3)8 позволяет получать в реакции с активированными алкилгалогенидами моно- и диалкилированные продукты с хорошим выходом. В результате выделены два изомера дигидрида С70(CF3)8H2 и 4 изомера С70(CF3)8(СH3)2, строение которых установлено на основании данных РСА, спектроскопии ЯМР на ядрах 1Н, 13С и 19F и масс-спектрометрии МАЛДИ и ХИАД, что позволило объяснить наблюдаемый изомерный состав продуктов реакции алкилирования. Электронные свойства выделенных в индивидуальном виде при помощи ВЭЖХ гидридов и алкилрованных производных C70(CF3)8 были комплексно изучены методами циклической вольтамперометрии, спектроскопии поглощения в УФ и видимом диапазонах, а также флуоресцентной спектроскопии. На основании полученных данных рассчитаны значения энергий граничных молекулярных орбиталей, ширина энергетического зазора, а также квантовый выход флуоресценции, что позволило выявить взаимосвязь между мотивом расположения функциональных групп на каркасе фуллерена и наблюдаемыми электронными свойствами.

**Литература**

1. A. Kausar. Breakthroughs of fullerene in optoelectronic devices - An overview // *Hybrid Advances*, **2024**, 6, 100233.

2. Belov N.M., Apenova M.G., Rybalchenko A.V., Borkovskaya E.V., Lukonina N.S., Goryunkov A.A., Ioffe I.N., Troyanov S.I. and Sidorov L.N. Transalkylation of Higher Trifluoromethylated Fullerenes with C70: A Pathway to New Addition Patterns of C70(CF3)8. // *Chem. Eur. J.*, **2014**, 20. 1126–1133.