**Синтез и строение C70(CF3)H — перспективного фотокатализатора**

**восстановления молекулярного кислорода**

***Мазуров С.С.***

*Студент, 1 курс бакалавриата*

*Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова,*

*факультет наук о материалах, Москва, Россия*

*E-mail: mazurovss@my.msu.ru*

Одним из важнейших направлений науки являются исследования в области «зеленых» источников энергии, множество современных работ посвящено топливным элементам. Несмотря на очевидные успехи, существует ряд проблем, среди которых можно выделить относительно невысокую скорость реакции восстановления молекулярного кислорода. Приемлемых скоростей реакции можно достичь при использовании катализаторов на основе дорогостоящих металлов платиновой группы. В последние годы ведется активная научно-исследовательская работа, направленная на поиск альтернативных каталитических систем, в частности, на основе металл-несодержащих органических молекул, что позволило бы снизить стоимость изготовления топливных элементов.

В литературе [1] есть несколько примеров производных фуллеренов, которые выступают катализаторами восстановления молекулярного кислорода. Основная идея данной работы заключается в применении водородсодержащих производных фуллеренов в электрокаталитическом цикле, включающем (1) генерацию моноанион-радикалов, (2) восстановление молекулярного кислорода с образованием анионов фуллеренов и (3) протонированием анионов в исходный фуллерен. В недавней работе [2] на примере фуллерена С60 был разработан одностадийный региоселективный синтез смешанного производного С60(СF3)H. Для фуллерена С70 была показана лишь принципиальная возможность протекания реакции с образованием изомерной смеси продуктов С70(СF3)H, строение которых было предположено на основании данных спектроскопии поглощения в УФ и видимом диапазонах.

В данной работе изомерные смешанные производные C70(CF3)H были синтезированы термолизом трифторацетата цезия по оптимизированной методике, позволившей увеличить выход целевых продуктов. Мониторинг протекания реакции проводили методом ВЭЖХ-МС. Индивидуальные изомеры C70(CF3)H были выделены и охарактеризованы методами спектроскопии ЯМР 1H, 13C и 19F, поглощения в УФ и видимом диапазоне. Строение одного из изомеров однозначно определено методом РСА благодаря сокристаллизации с октаэтилпорфирином никеля(II), который затормаживает вращение фуллереновой молекулы в кристалле.

Образование смеси изомеров C70(CF3)H является следствием понижения симметрии молекулы С70 по сравнению с С60. Так, теоретически возможно образование пяти изомеров интермедиатов C70(CF3)–. Привлечение квантово-химических расчетов методом теории функционала плотности (PBE/TZ2p) позволило объяснить региоселективность образования продуктов реакции установленного строения.

**Литература**

1.R.M.Giron, Juan Marco-Martınez, Sebastiano Bellani, Alberto Insuasty, Hansel Comas Rojas, Gabriele Tullii, Maria Rosa Antognazza, Salvatore Filippone, Nazario Martın. J. Mater. Chem. A 4 (2016) 14284.

2.Alexey V. Rybalchenko, Tatiana V. Magdesieva, Victor A. Brotsman, Nikita M. Belov, Vitali Yu. Markov, Ilya N. Ioffe, Adrian Ruff, Paul Schuler, Bernd Speiser, Jürgen Heinze, Lev N. Sidorov, Alexey A. Goryunkov, The first representative of a new family of the bridgehead-modified difluoromethylenated homofullerenes: electrochemical properties and synthetic availability // Electrochimica Acta – 2015 – Vol.174, P. 143-154.

3.V.P. Bogdanov, V.A. Dmitrieva, V.A. Ioutsi, N.M. Belov, A.A. Goryunkov, Alkali metal trifluoroacetates for the nucleophilic trifluoromethylation of fullerenes, Journal of Fluorine Chemistry. (2019) 109344.