


«Сухая вода»  
помогла измерить  
поляризацию  
ковалентных  
связей

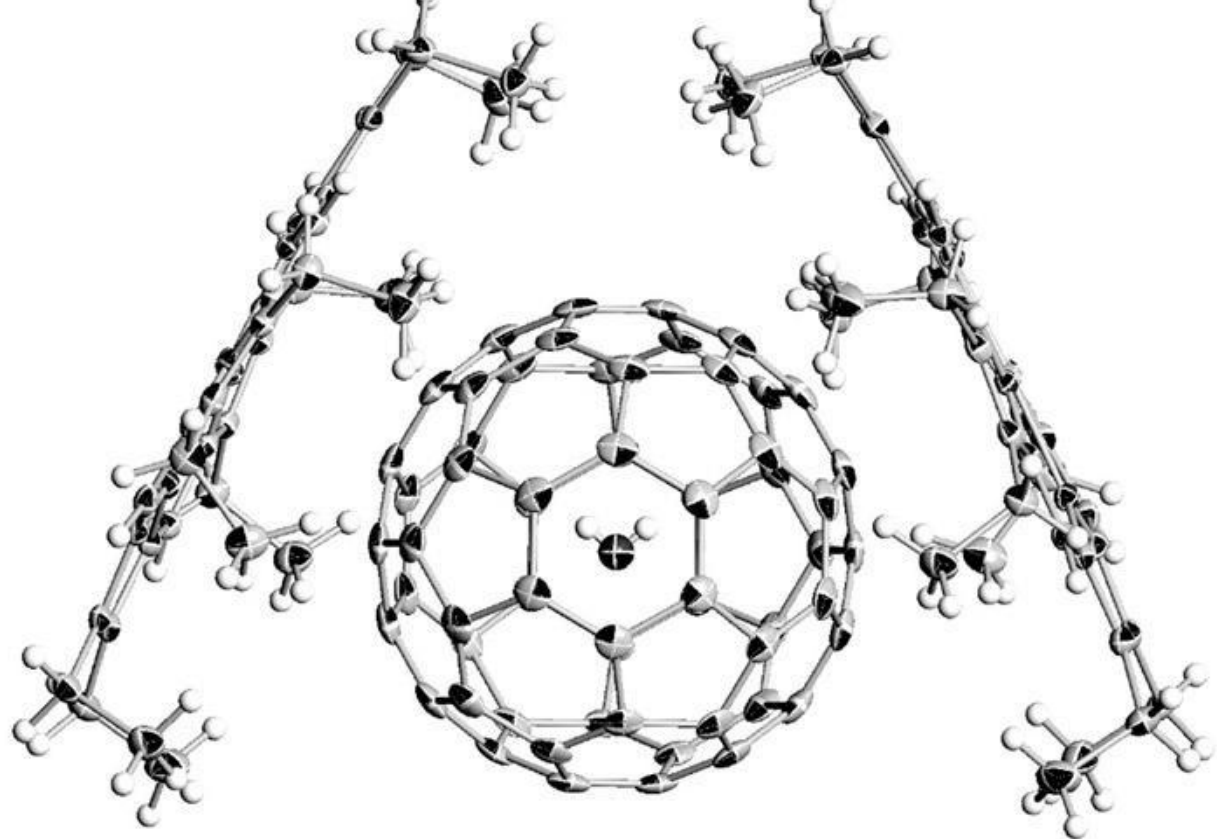
Выполнила Кузнецова В.Е.

---



Химикам из Киотского университета (Япония) удалось запереть одну молекулу воды в фуллерене  $C_{60}$ . Несмотря на отсутствие химических связей между молекулой воды и углеродами фуллерена, молекула в целом получилась полярной. Авторы смогли использовать такую составную молекулу для измерения поляризации ковалентных связей, чего еще не удавалось сделать до сих пор прямыми экспериментальными способами.

Рис. 1. Структура фуллерена C<sub>60</sub> с заключенной внутри молекулой воды и с двумя молекулами октаэтилпорфирина никеля(II) по бокам, Полученная методом рентгенокристаллографии.



Формула молекулы выглядит так: H<sub>2</sub>O@C<sub>60</sub>•(NiOEP)<sub>2</sub>. Порфирин был добавлен, чтобы получить монокристаллы H<sub>2</sub>O@C<sub>60</sub>, пригодные для анализа этим методом. Знак @ в такой нотации указывает на то, что молекула (в данном случае — молекула воды) заключена внутри фуллерена C<sub>60</sub>.

Иллюстрация из статьи K. Kurotobi, Y. Murata, 2011. A Single Molecule of Water Encapsulated in Fullerene

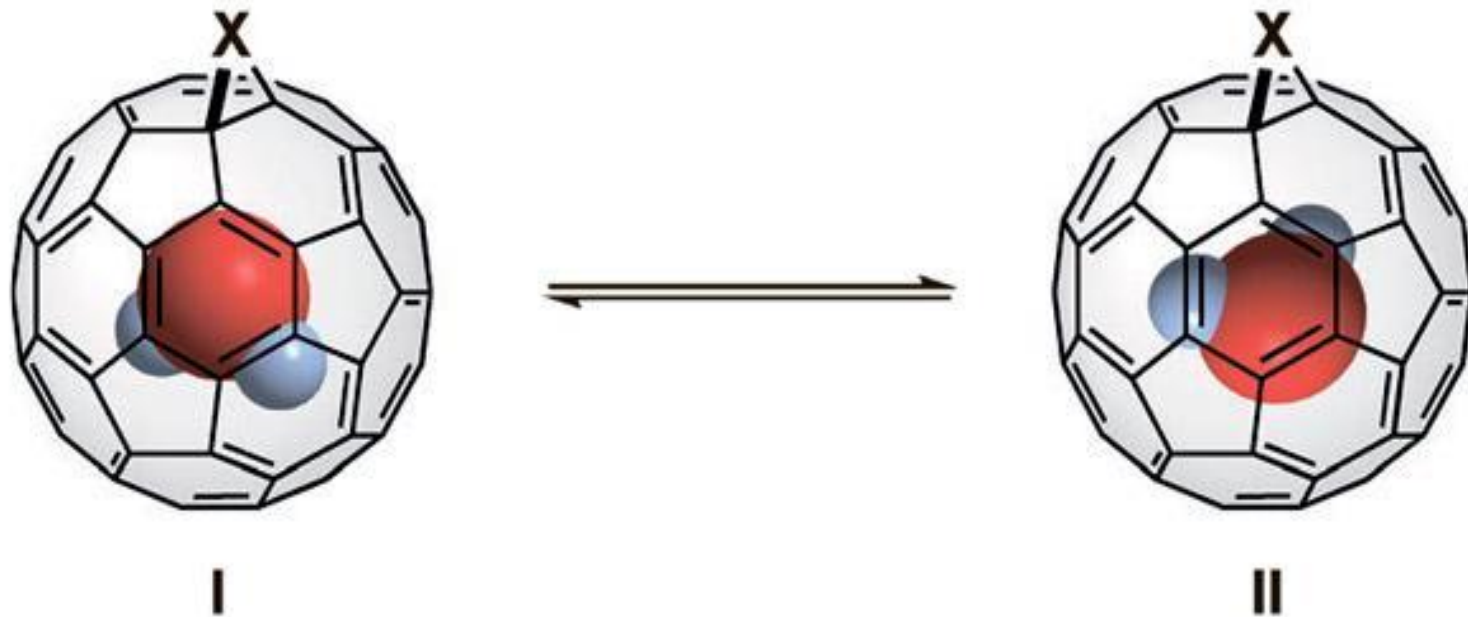



Рис. 2. Два варианта расположения молекулы воды внутри фуллерена. В конформере I (слева) вода повернута к внешней группе X кислородом, а в конформере II — водородами. Иллюстрация из обсуждаемой статьи в *Angewandte Chemie*



Несмотря на ожидаемость результатов, методика очень интересна и может пригодиться в будущем для более сложных случаев. Например, можно будет измерять, как меняется поляризация ковалентных связей под воздействием различных химических модификаций, глубже понять химические процессы и механизмы реакций. Также будет очень интересно посмотреть, можно ли каким-либо внешним воздействием заставить воду туннелировать протон



Спасибо за внимание!