Похожая по форме на луковицу полая клетка кластера состоит из двадцати атомов скандия, расположенных в вершинах восьмиугольников и шестидесяти атомов углерода, находящихся в вершинах пятиугольников.

Наноразмерные полые кластеры, содержащие и металл, и углерод, привлекают значительный интерес благодаря своим уникальным свойствам и представляют практический интерес с точки зрения применения в электронике и катализе. После синтеза бакминстерфуллерена C_{60} исследователи получили (или теоретически предсказали возможность получения) большого количества каркасных структур, состоящих из атомов углерода и металла, но волейболен представляет собой первое соединение, содержащее атомы скандия.

Исследователи из группы Йина Лю (Ying Liu) из Университета Хебей изучили шесть молекулярных структур, содержащих различные комбинации пятиугольников из углерода и атомов скандия. Исследователи оптимизировали геометрии изучаемых структур и изучали их строение. Было обнаружено, что несмотря на значительные искажения длин связей и валентных углов, структуры, для которых была достигнута минимизация энергии, отличались одной общей чертой – субъединицами этих структур являлись фрагменты Sc_8C_{10}. Наименьшей энергией отличается волейболен $Sc_{20}C_{60}$, что делает его наиболее энергетически выгодным.

Каждая из субъединиц представляет собой два пятиугольника из углерода, окруженных одним восьмиугольником из атомов скандия. Шесть субъединиц объединяются в объемную полую структуру, напоминающую волейбольный мяч. Отличаясь относительно значительным зазором между ВЗМО и НСМО (1.471 эВ), волейболен может представлять собой интересную и очень устойчивую разновидность полых каркасных металл-углеродных кластеров.

В перспективе китайские химики планируют не только синтезировать волейболен, существование которого предсказано теоретически, но и получить его производные, инкорпорирующие

внутри полой углерод-скандиевой клетки другие атомы и, возможно, молекулы.

Источник: Nanoscale, 2016, DOI: 10.1039/c5nr07784b