

СИНТЕЗ ТА СПЕКТРОСКОПІЧНЕ ДОСЛІДЖЕННЯ КОМПОЗИТІВ НА ОСНОВІ ФУЛЕРЕНУ C₆₀ ТА СИЛІЦІЙ ДІОКСИДУ

Хаврюченко О.В.

Київський національний університет імені Тараса Шевченка
alexk@compchem.kiev.ua

Фулерен C₆₀ привертає увагу дослідників як з точки зору цікавих фізичних властивостей і здатності до хімічної модифікації, так і до незвичайної самоорганізації поверхонь з різним ступенем кривизни. Препарати на основі фулерену проявляють цікаві біологічні властивості *in vitro* та *in vivo*, зокрема, в залежності від модифікації та опромінення вони можуть поводитись як сильні антиоксиданти або виявляти прооксидантні властивості [1], що може бути використано для лікування злоякісних новоутворень [2, 3]. Дослідження фулеренових композитів на основі кремнеземів цікаве в кількох аспектах: 1) взаємодія фулеренів з поверхнею часто призводить до підсилення їх властивостей або появи нових; 2) використання кремнеземів як носіїв розширює область практичного застосування фулерену, наприклад, дозволяє здійснити транспорт таких сполук в біологічних системах завдяки гідрофільності системи; 3) застосування композитів замість чистих фулеренових зразків зменшує вартість продукції на їх основі. Нами досліджено сорбцію фулерену з толуенових розчинів різної концентрації на чистому пірогенному кремнеземі (аеросилі) та полігідридсилоксані. Також проаналізовано взаємодію фулерену з діоксидами силіцію регулярної мезопоруватої структури. Проведені нами квантовохімічні розрахунки (напівемпіричний метод РМЗ, комплекс програм QuChem) взаємодії фулерену с гідроксильованою, дегідроксильованою та гідридною поверхнями кремнезему разом з експериментальними даними свідчать про фізичну природу сорбції на поверхнях без активних функціональних груп. Також розрахунки вказують на можливість проходження хімічних реакцій гідридного переносу чи ковалентного зв'язування між фулереном та полігідридосилоксаном чи дегідроксильованою поверхнею аеросилу, відповідно.

Цікаві наслідки дало дослідження ІЧ спектрів у області 1900-2900 см⁻¹ фулеренових зразків з різною попередньою підготовкою. В цій зоні "оптичного вікна" було виявлено ряд малоінтенсивних смуг, попередньо віднесених до продуктів часткової деструкції та окиснення C₆₀. Аналогічні смуги спостерігаються в спектрах фулеренових плівок [4], що вказує на їх недомішкову природу.



1. A. Golub, *etc.* J.Mol.Liq., 2003, V.105, P.141.
2. Yu.I.Prylutskyy, *etc.* Mater. Sci.& Eng.C, 2003, V. 23, P.109.
3. G.V.Didenko, *etc.* Exper.oncol. 2003, P.116.
4. Toshiaki Hara, *etc.* Journal of Applied Physics, 2002, V.92, P.7302.