УДК 544.723.2

**Влияние свойств растворителя на спектр**

**флуоресценции фуллерена С60**

**Т.А. Меределина**

*Благовещенский государственный педагогический университет (г. Благовещенск)*

*biofirm@mail.ru*

*В данной работе показано, что взаимодействие молекул матрицы с молекулами внедренного вещества оказывает существенное влияние на спектральные характеристики. Рассмотрены условия способствующие получению спектров флуоресценции С60, к которым можно отнести геометрию и π-электронные подсистемы взаимодействующих молекул, плотность и вязкость растворителя матрицы.*

Инструментом изучения квантовых свойств и строения атома может являться линейчатый спектр. Для получения линейчатых спектров флуоресценции многоатомных молекул углеродных модификаций удобно использовать метод Шпольского. Применение данного метода предусматривает подбор удобной матрицы, в которую встраиваются молекулы исследуемого вещества при криогенных температурах. В работе приведены результаты получения спектров люминесценции фуллерена С60 в кристаллических матрицах четырех органических растворителей: гептане, гексане, толуоле, орто-ксилоле.

Фуллерен С60 является одной из аллотропных модификаций углерода, состоящей из 60 атомов углерода, образующих полую сферическую структуру, внешний диаметр полости составляет 0,7 нм, внутренний каркас имеет диаметр 5 Ǻ. Между молекулами кристалла нет химической связи, каждая отдельная сфера-молекула сохраняет свою индивидуальность, целостности кристалла способствуют силы Ван-Дер-Ваальса [1]. При комнатной температуре были приготовлены растворы фуллерена С60 с концентрациями 10-2 – 10-7 моль/л в каждом растворителе. Все растворители химически нейтральны к углероду, легко кристаллизуются при температуре T = 77,3 К, оптически прозрачны (таб. 1).

**Таблица 1. Характеристики растворителей**

|  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- |
| Свойство | Гексан (C₆H₁₄) | Гептан (C₇H₁₆) | Орто-ксилол (C8H10) | Толуол (C7H8) |
| Плотность, г/см³ | 0,660 | 0,684 | 0,880 | 0,867 |
| Диэлектрическая проницаемость | 1,89 | 1,92 | 2,56 | 2,38 |
| Полярность (индекс полярности) | 0,0 | 0,0 | 2,5 | 2,4 |
| Вязкость при 20°C, мПа·с | 0,326 | 0,386 | 0,81 | 0,59 |
| Растворимость фуллерена C₆₀, мг/мл | 0,0028 | 0,0015 | 6,0 | 2,8 |
| Структурная формула молекулы |  |  |  |  |

Образцы в замороженном состоянии облучались твердотельным лазером АВМ УФ 400К с длиной волны 365 нм. Спектры флуоресценции фиксировались на высокочувствительную ПЗС линейку TCD1304DG на спектрограф ИСП-51, обработка данных осуществлялась в программе №2017616306 «Модуль автоматизации спектрального анализа для спектрографа ИСП-51» [2].

Анализ результатов, представленных в таблице 2, показывает, что для сравнения спектров, полученных в разных матрицах, удобнее взять растворы с концентрацией 10-6моль/л. При данной концентрации все растворители разрешают три линии 678,5 нм, 677 нм, 674,5 нм с полуширинами от 4,25 см-1 до 10,20 см-1, с уменьшением концентрации падает интенсивность спектров. Линия 678,5 нм разрешима во всех матрицах, имеет максимальную интенсивность и минимальную полуширину. По данной линии удобно сравнить спектры фуллерена в четырех растворителях.

**Таблица 2.** **Характеристики полос спектра флуоресценции фуллерена С60**

**в матрицах гексана, гептана, толуола и орто-ксилола**

|  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- |
| Концентрация С60 | Гексан | Гептан | Толуол | Орто-ксилол |
| Длина волны, нм | Интенсивность, у.е. | Ширина, см-1 | Длина волны, нм | Интенсивность, у.е. | Ширина, см-1 | Длина волны, нм | Интенсивность, у.е.  | Ширина, см-1 | Длина волны, нм | Интенсивность, у.е.  | Ширина, см-1 |
| 10-2 | 678,58676,86674,25 | 14481357864 | 4,794,7010,98 | 678,34676,66 | 12541151 | 4,674,19 | 678,36676,86 | 12621202 | 6,55,98 | 678,33 | 1021 | 7,22 |
| 10-3 | 678,61677,17674,49 | 14061338855 | 4,784,5510,36 | 678,15676,74674,52 | 11791144945 | 4,694,96,32 | 678,4676,95674,49 | 11351162831 | 6,096,427,22 | 678,49 | 989 | 7,27 |
| 10-4 | 678,43678,84674,42 | 13541278850 | 4,934,4510,20 | 678,39676,62674,03 | 11041136886 | 5,994,866,32 | 678,51676,98674,22 | 11111190885 | 5,235,207,12 | 678,49676,9 | 952879 | 7,338,57 |
| 10-5 | 678,51677,14674,41 | 13361258860 | 4,814,288,42 | 678,39676,74674,07 | 11021122853 | 4,34,955,98 | 678,64677,04674,58 | 10471103916 | 4,574,107,02 | 678,57676,48674,49 | 933847757 | 6,078,3510,48 |
| 10-6 | 678,4676,86674,42 | 13781219809 | 4,804,287,91 | 678,42676,9674,12 | 10661062821 | 4,13,796,87 | 678,54677,14674,58 | 10241041917 | 4,744,995,73 | 678,49676,71674,31 | 930846725 | 6,648,4510,37 |
| 10-7 | 678,34676,75674,31 | 12431179888 | 4,814,257,69 | 678,15676,65673,91 | 10051034813 | 3,824,154,09 | 678,54677,06674,39 | 10031037907 | 5,035,4712,39 | 678,49676,51674,31 | 929843716 | 7,138,5711,87 |

Наибольшая интенсивность спектра в гексане говорит о том, что гексановая матрица оказывает наименьшее влияние на внедренные молекулы фуллерена. По таблице 1 видно, что гексан имеет минимальную плотность, вязкость и полярность по сравнению с другими растворителями. Самым плотным из представленных растворителей является орто-ксилол, в нем фуллерен С60 имеет самую большую растворимость, между молекулами С60 и матрицей возникает взаимодействие, приводящее к размыванию спектра.

Для объяснения полученных результатов, необходимо сравнить так же геометрию молекул матрицы и внедренного вещества. Молекула фуллерена фиксируется в матрице несколькими молекулами растворителя, видимо короткие молекулы гексана плотнее остальных упаковывают её в кристалле матрицы. Не последнюю роль при взаимодействии матрицы и молекулы фуллерена имеет наличие π-электронов взаимодействующих молекул. Молекулы гексана и гептана не имеют двойных и тройных связей, π-электронная подсистема у них отсутствует. Орто-ксилол и толуол обладают ароматической природой и могут вступать во взаимодействие с π-электронной системой молекулы фуллерена, что приводит к уширению спектра и снижению интенсивности линий.

Таким образом, растворители матрицы существенно влияют на характеристики спектра флуоресценции, при подборе более удобной матрицы для объемных многоатомных молекул важно учитывать геометрию взаимодействующих молекул, наличие π-электроннов в системе, такие свойства растворителей, как плотность и вязкость.

**Л И Т Е Р А Т У Р А**

1. Никитина Ю. Н., Зотова А. В., Ягафарова З. А. Структура и физические свойства фуллерена - С60 // Научно-методический электронный журнал «Концепт». – 2017. – Т. 2. – С. 37–39. – URL: <http://e-koncept.ru/2017/570009.htm>.
2. Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ №2017616306 «Модуль автоматизации спектрального анализа для спектрографа ИСП-51». Автор: Антонов А.А. Зарегистрировано в Реестре программ для ЭВМ 07 мая 2019 г.