УДК 544.723.2

**Влияние свойств растворителя на спектр**

**флуоресценции фуллерена С60**

**Т.А. Меределина**

*Благовещенский государственный педагогический университет (г. Благовещенск)*

[*biofirm@mail.ru*](mailto: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 | 678,58  676,86  674,25 | 1448  1357  864 | 4,79  4,70  10,98 | 678,34  676,66 | 1254  1151 | 4,67  4,19 | 678,36  676,86 | 1262  1202 | 6,5  5,98 | 678,33 | 1021 | 7,22 |
| 10-3 | 678,61  677,17  674,49 | 1406  1338  855 | 4,78  4,55  10,36 | 678,15  676,74  674,52 | 1179  1144  945 | 4,69  4,9  6,32 | 678,4  676,95  674,49 | 1135  1162  831 | 6,09  6,42  7,22 | 678,49 | 989 | 7,27 |
| 10-4 | 678,43  678,84  674,42 | 1354  1278  850 | 4,93  4,45  10,20 | 678,39  676,62  674,03 | 1104  1136  886 | 5,99  4,86  6,32 | 678,51  676,98  674,22 | 1111  1190  885 | 5,23  5,20  7,12 | 678,49  676,9 | 952  879 | 7,33  8,57 |
| 10-5 | 678,51  677,14  674,41 | 1336  1258  860 | 4,81  4,28  8,42 | 678,39  676,74  674,07 | 1102  1122  853 | 4,3  4,95  5,98 | 678,64  677,04  674,58 | 1047  1103  916 | 4,57  4,10  7,02 | 678,57  676,48  674,49 | 933  847  757 | 6,07  8,35  10,48 |
| 10-6 | 678,4  676,86  674,42 | 1378  1219  809 | 4,80  4,28  7,91 | 678,42  676,9  674,12 | 1066  1062  821 | 4,1  3,79  6,87 | 678,54  677,14  674,58 | 1024  1041  917 | 4,74  4,99  5,73 | 678,49  676,71  674,31 | 930  846  725 | 6,64  8,45  10,37 |
| 10-7 | 678,34  676,75  674,31 | 1243  1179  888 | 4,81  4,25  7,69 | 678,15  676,65  673,91 | 1005  1034  813 | 3,82  4,15  4,09 | 678,54  677,06  674,39 | 1003  1037  907 | 5,03  5,47  12,39 | 678,49  676,51  674,31 | 929  843  716 | 7,13  8,57  11,87 |

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.