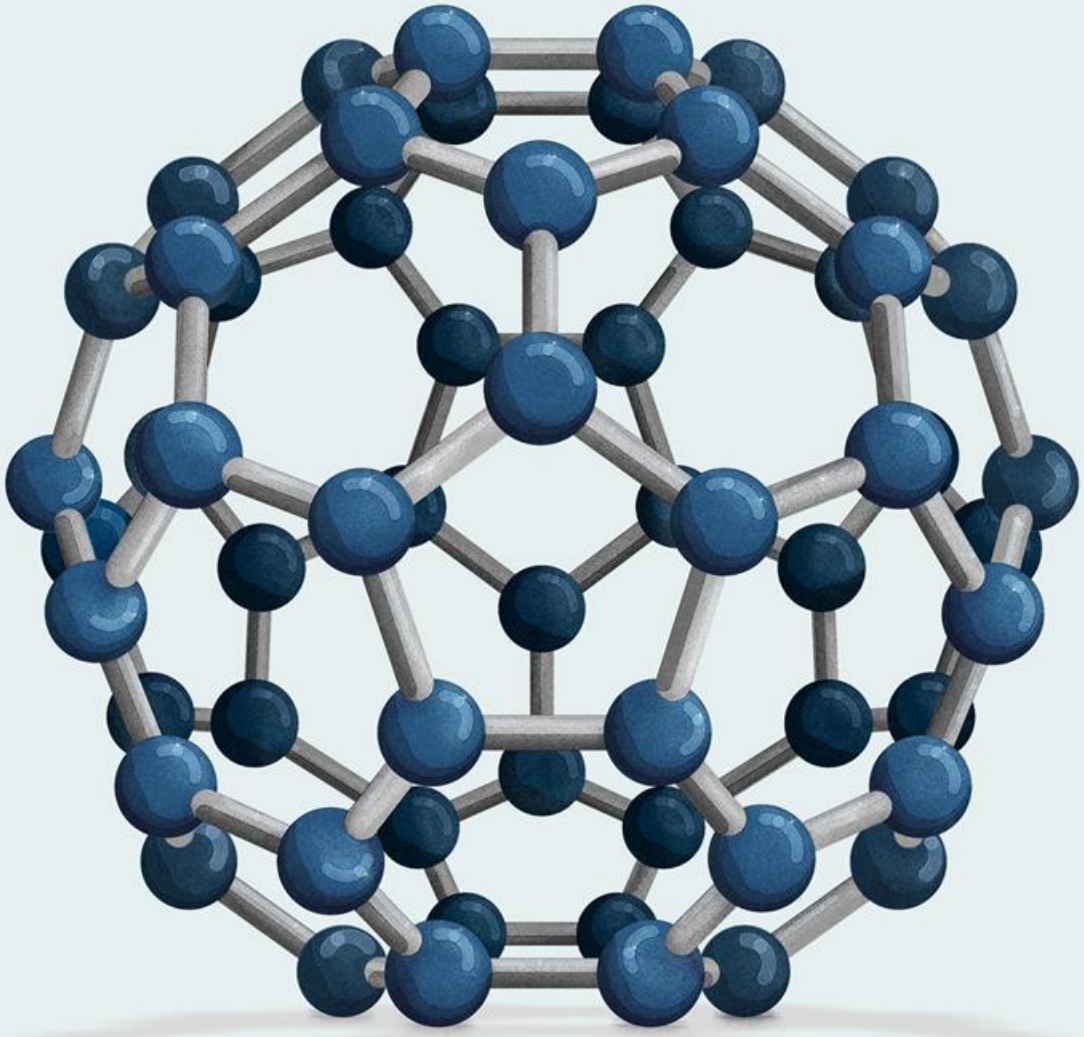
Фуллерен туындыларының түзілуіне сыртқы әсерлер

Фуллерен туындысы көміртек қаңқасына атом немесе атомдар тобы химиялық жолмен қосылғанда түзіледі.



C_{60} молекуласының моделі

Жалынның физикалық параметрлері

Температура

Көміртекті аралық бөлшектердің түзілуі мен әрі қарай әрекеттесу жылдамдығына әсер етеді.

Қысым

Газдың тығыздығы мен бөлшектердің соқтығысу жиілігін өзгертеді.

Ыстық аймақта болу уақыты

Ыстық аймақта ұзағырақ болған бөлшектер әрі қарай түрленуі мүмкін.



Зертханалық жалынның көрінісі

Жалын құрамы және фуллерен оксидтері

Бензол мен оттек жалынының өнімдерінен екі фуллерен монооксиді анықталған.

$C_{60}O$

C_{60} фуллеренінің монооксиді

$C_{70}O$

C_{70} фуллеренінің монооксиді

Көміртек пен оттектің атомдық қатынасы өзгергенде фуллерендер мен олардың оксидтерінің шығымы әртүрлі өзгереді.

Жарық пен қыздырудың әсері

Ерітіндідегі C_{60} озонидінен ($C_{60}O_3$) әсер түріне қарай $C_{60}O$-ның әртүрлі изомерлері түзіледі.

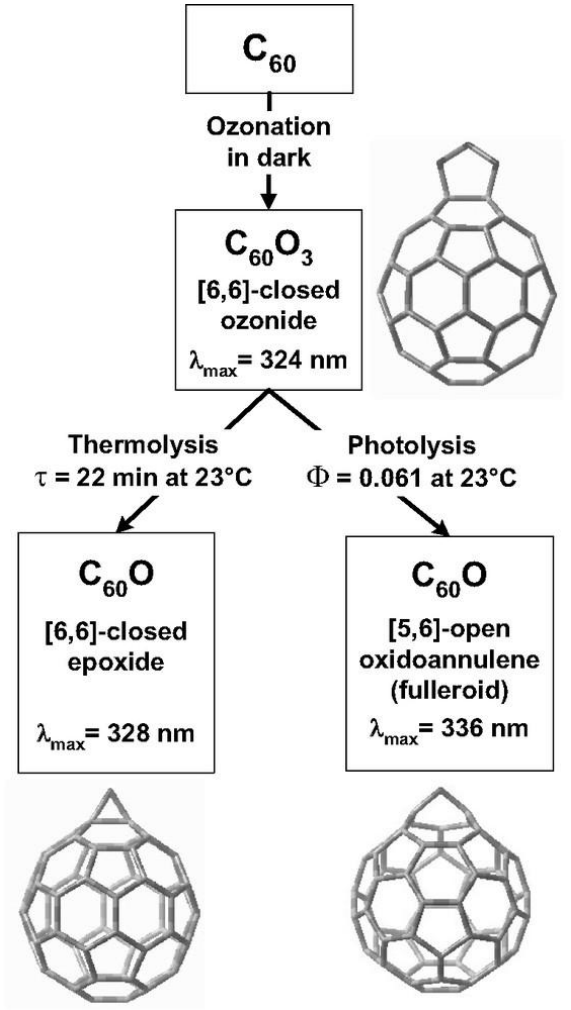
Қыздыру кезінде

[6,6]-эпоксид түзіледі.

Жарық әсерінен

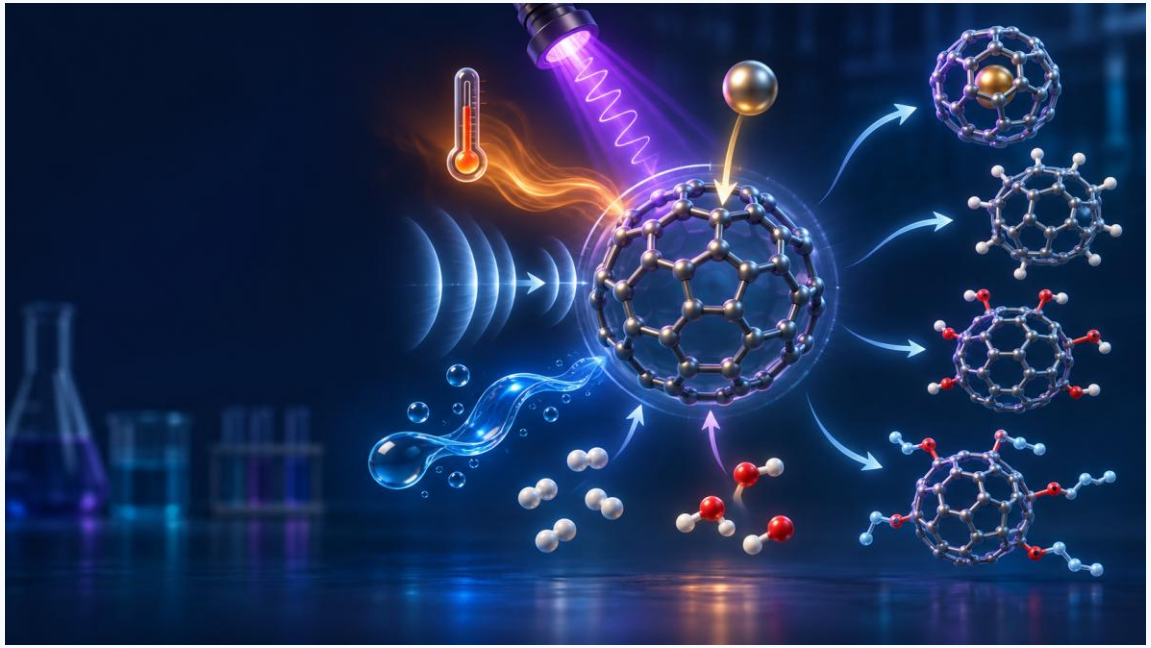
[5,6]-ашық оксидоаннулен түзіледі.

Екі изомердің молекулалық формуласы бірдей, атомдарының байланысу реті әртүрлі.



Heymann және Weisman, 2006

Фуллерен туындылары және функционализация



Функционализацияның мақсаты

- Суда және органикалық ортада еру қабілетін арттыру.
- Электрондық және фотохимиялық қасиеттерді реттеу.
- Биологиялық белсенділік пен дәрі тасымалдау қабілетін енгізу.

Негізгі туындылар

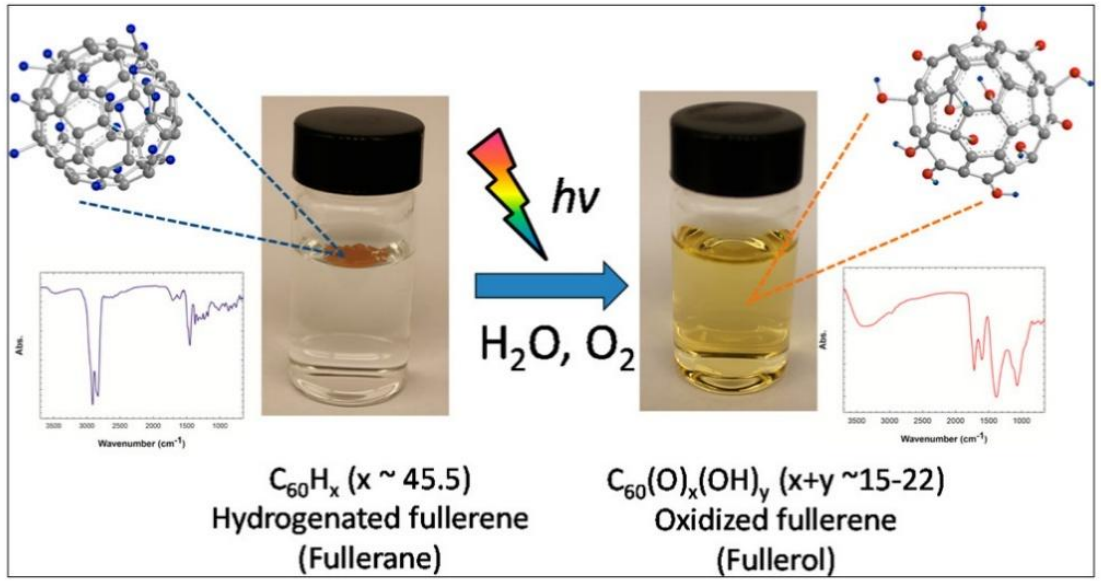
Гидрофуллерендер $C_{60}H_x$
Фуллерен қышқылдары мен эфирлері
Металл-фуллерендер MC_{60}
Полимерленген фуллерендер

Түзілуге әсер ететін сыртқы факторлар

Температура	Реакция жылдамдығын және қосылу бағытын өзгертеді.
Қысым	Гидрогенизация мен газ фазасындағы тепе-теңдікке әсер етеді.
Сәулелену	Фотоиндукцияланған тотығуды және радикалдар түзілуін күшейтеді.
Еріткіш ортасы	Ерігіштікке, бөлшектердің тұрақтылығына және өнім құрамына ықпал етеді.
Оттек мөлшері	Оттекті функционалдық топтардың қосылуын және тотығу жылдамдығын анықтайды.

Туындылардың түзілу жылдамдығы сыртқы факторлардың бірлескен әсеріне тәуелді.

Гидрофуллерендердің тотығуы

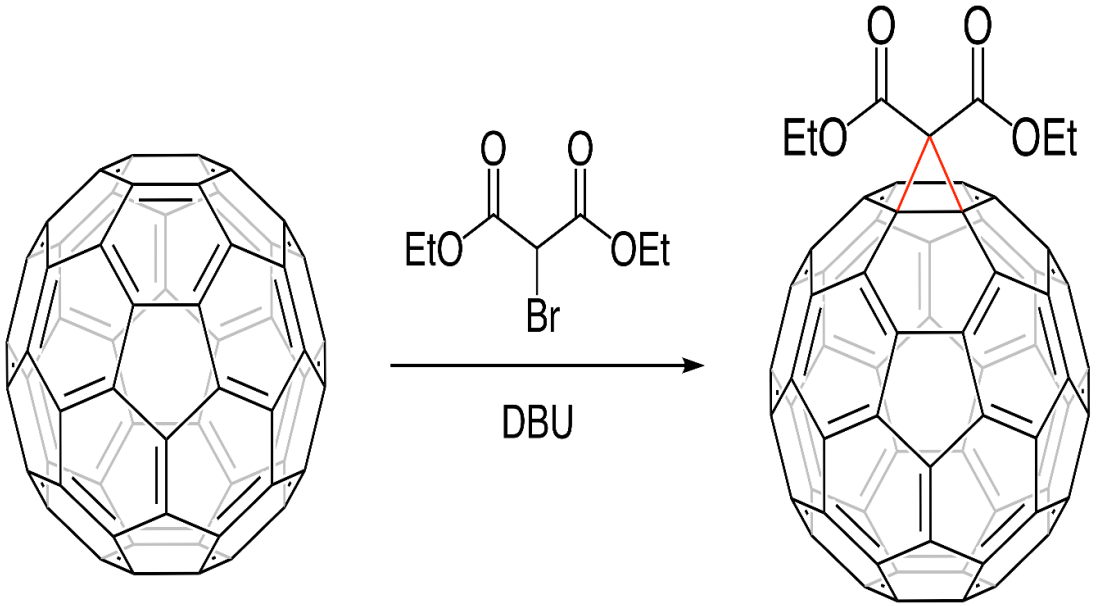


$C_{60}H_x$ туындылары

- Сутек атомдары қосылғанда қос байланыстар мен электрондық қасиеттер өзгереді.
- Жарық пен еріген оттек реакция кинетикасына тікелей әсер етеді.
- Гидроксил радикалы негізгі реактивті оттегі түрлерінің бірі.
- Тотығу гидрофильділікті арттырып, суда еруін жеңілдетеді.

Қолданылуы: сутек сақтау, литий батареялары және антиоксиданттық жүйелер

Коваленттік функционализация және Бингель реакциясы

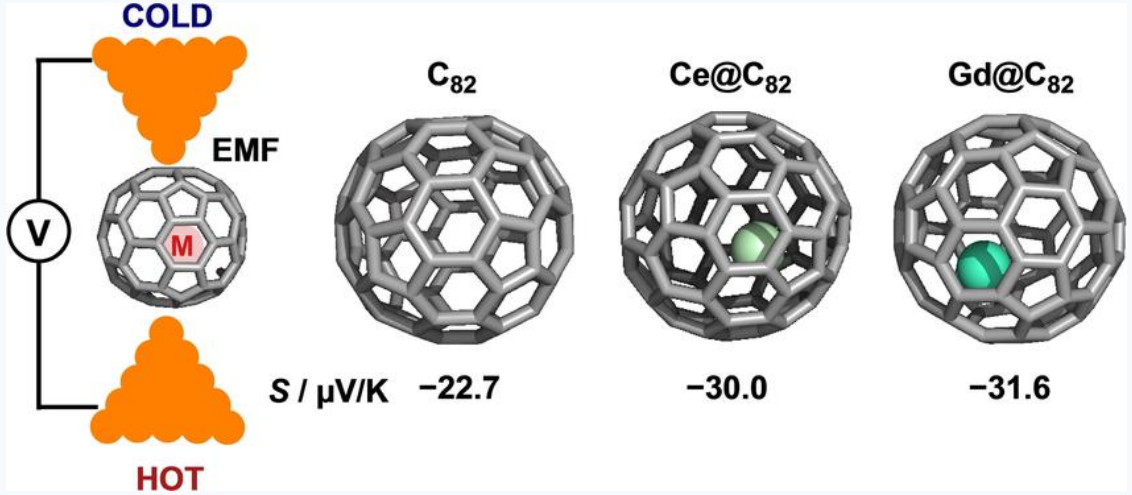


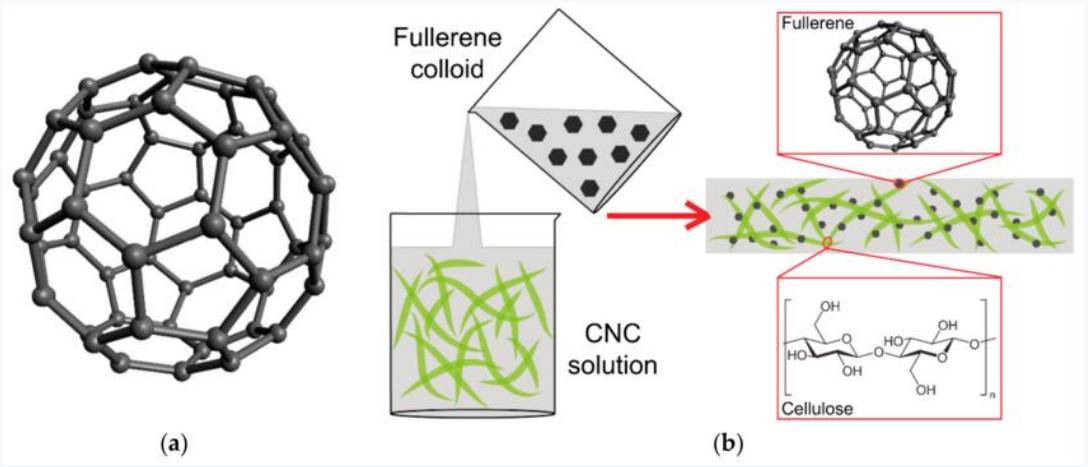
Бингель реакциясының кезеңдері

1. Негіз малонаттан протонды бөліп, карбанион түзеді.
2. Карбанион C_{60} молекуласының 6–6 қос байланысына шабуылдайды.
3. Бромид ығысып, үш мүшелі метано-көпір түзіледі.
4. **Малонат тобы ерігіштік пен электрохимиялық қасиеттерді өзгертеді.**

Нәтиже: метанофуллерен және мақсатты функционалдық топтар

Металл және полимерлі фуллерендер





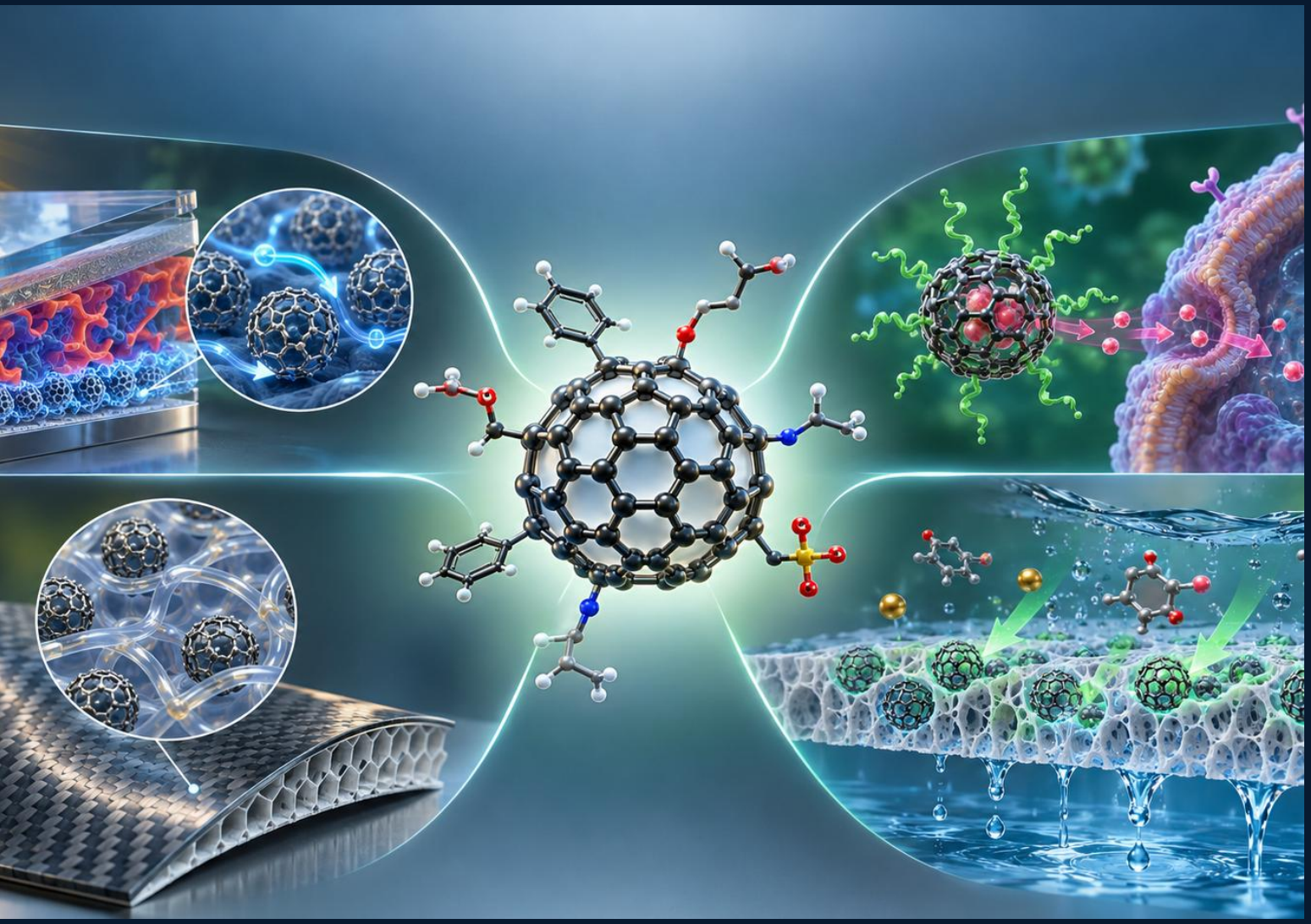
Металл-фуллерендер

$M@C_{60}$ және $M@C_{82}$ құрылымдарында металл атомы тордың ішінде немесе бетінде орналасады. Электрондық, магниттік және катализдік қасиеттер өзгереді.

Полимер-фуллерен композиттері

Полимер матрицасына енгізілген фуллерен беріктікті, термиялық тұрақтылықты және электрөткізгіштікті арттырады. Энергия сақтау жүйелерінде қолданылады.

Қолданылу салалары және қорытынды



Негізгі бағыттар

Электроника және күн энергетикасы

PCBM электрон қабылдаушы қабат ретінде заряд тасымалын жақсартады.

Медицина және биотехнология

Суда еритін туындылар антиоксидант, дәрі тасымалдаушы және сенсор ретінде зерттеледі.

Материалтану және экология

Нанокомпозиттер, газ сақтау, су тазалау мембраналары және катализдік жүйелер.

Қорытынды: функционализация C_{60} молекуласының ерігіштігін, реакциялық және биологиялық қасиеттерін мақсатты түрде басқаруға мүмкіндік береді.