Д10. Фуллерендердің экологиялық және токсикологиялық аспектілері

C_{60} / nC_{60}

Экологиялық тағдыр • Әсер ету • Қауіп-қатер

Дәрістің мақсаты және мазмұны

Мақсат

Фуллерендердің қоршаған ортадағы мінез-құлқы мен ықтимал экотоксикологиялық әсерін ғылыми тұрғыда бағалаудың негізгі қағидаларын меңгеру.

Оқу нәтижелері

C_{60} пен nC_{60} айырмасын түсіндіру; таралу жолдарын сипаттау; уыттылық деректерін сыни салыстыру; қауіп-қатерді бағалау жоспарын ұсыну.

I. Экологиялық тағдыр

Шығарындылар, дисперсия, агрегация, фототрансформация, шөгіндіге өту.

II. Токсикология және тәуекел

Әсер ету жолдары, биологиялық жауап, әдістемелік артефактілер, OECD ұсынымдары.

Неліктен фуллерендердің экологиясы маңызды?

Материал қасиеті

C_{60} — тұйық молекулалық көміртек қаңқасы; суда ерігіштігі төмен, бірақ коллоидтық агрегат түзе алады.

Қолдану салалары

Электроника, күн элементтері, зерттеу материалдары, функционалданған туындылар; өндіріс пен қалдық кезеңінде шығарылу ықтимал.

Бағалаудың қиындығы

Нақты әсер молекулалық құрылымнан бөлек дисперсия тәсіліне, қоспаларға, беттік химияға және қоршаған ортаға тәуелді.

Ғылыми қағида

«Барлық фуллерендер улы» немесе «барлығы қауіпсіз» деген тұжырымның екеуі де дәлелсіз жалпылау.

Негізгі терминдер мен анықтамалар

C_{60} фуллерені

60 көміртек атомынан тұратын молекулалық наноқұрылым.

nC_{60}

Сулы жүйеде түзілген C_{60} бөлшектері/агрегаттарының дисперстік фазасы; бұл еріген жеке молекуламен тең емес.

Экологиялық тағдыр (fate)

Ортадағы таралу, тасымалдану, өзгеру және жиналу процестерінің жиынтығы.

Экотоксикология

Химиялық немесе материалдық факторлардың организмдер мен экожүйелерге ықпалын зерттеу.

Қоршаған ортаға түсу жолдары

01

Өндіріс

Синтез, ұнтақпен жұмыс, тазарту

02

Қолдану

Материал тозуы және өнімнің қызмет етуі

03

Қалдық

Жуу суы, шлам, қатты қалдық

04

Орта

Су, топырақ, ауа, шөгінді

Нақты шығарындылардың мөлшері қолданылу саласы мен қалдықты басқару режиміне тәуелді.

C_{60}-тың физика-химиялық мінез-құлқы

Сулы орта

Гидрофобты C_{60} жеке молекула ретінде суда аз ериді; дисперстік nC_{60} тұрақты немесе тұрақсыз болуы мүмкін.

Агрегация

Иондық күш, pH, табиғи органикалық заттар мен электролит құрамы бөлшек өлшемін және шөгуін өзгертеді.

Беткі модификация

Гидроксил, карбоксил және өзге топтар дисперсияға, биожетімділікке және реакциялық белсенділікке әсер етеді.

Жарық әсері

Фотохимиялық өзгерістер мен ROS түзілуі материалға және нақты сәулелену жағдайына тәуелді.

Судағы ықтимал экологиялық тағдыр

01

Түсу

C_{60} бар ағын немесе бөлшек

02

Дисперсия

nC_{60} түзілуі; гидродинамика

03

Өзгеру

Агрегация / фототрансформация

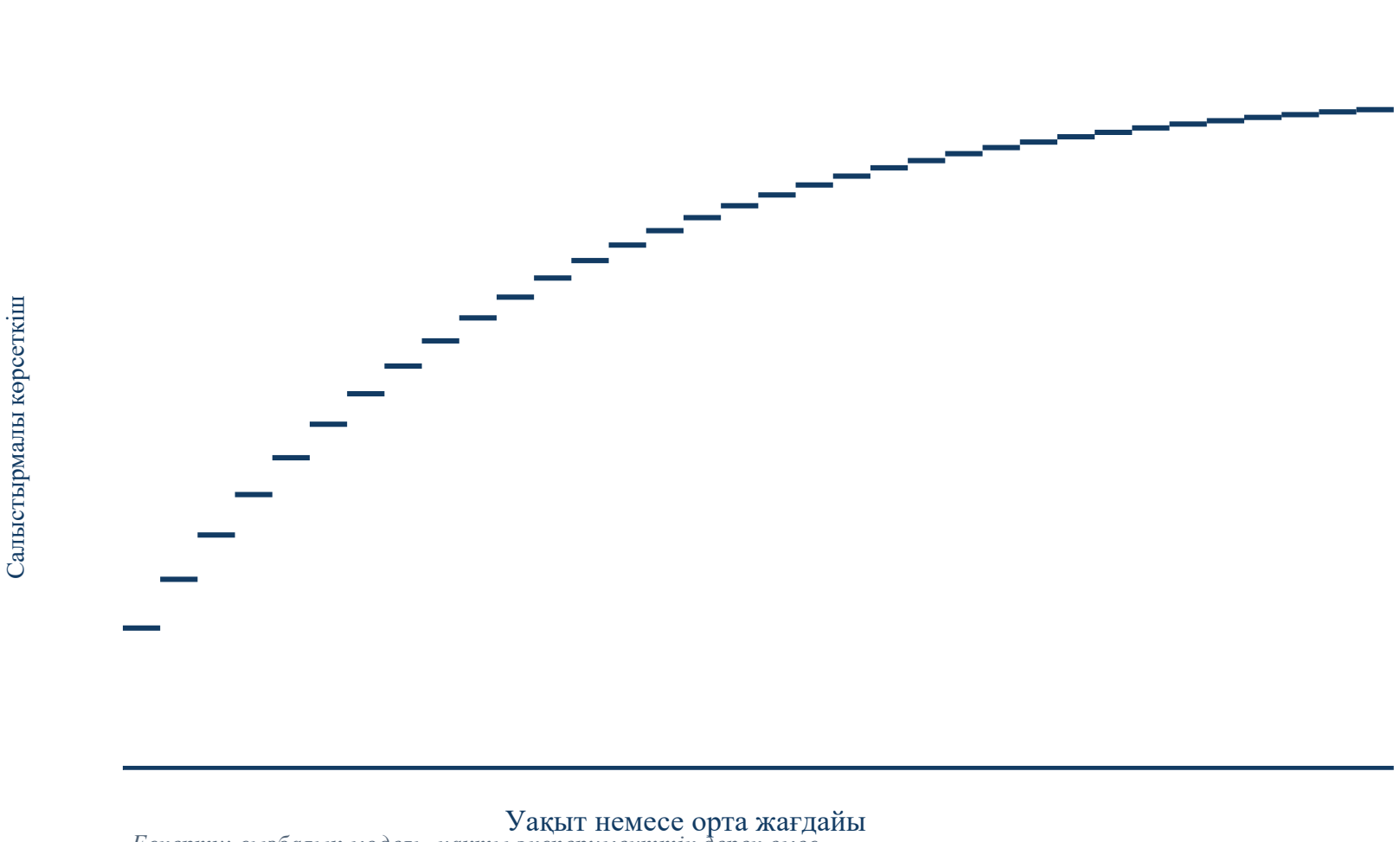
04

Таралу

Су қабаты ↔ шөгінді

Таралу жолы бір бағытты емес: ресуспензия, органикалық материямен әрекеттесу және қайта тасымалдану болуы мүмкін.

Агрегация және дисперсия тұрақтылығы



Ескерту: сызбалық модель, нақты эксперименттік дерек емес.

Агрегация динамикасы

Агрегация жылдамдығы иондық күшке, беттік зарядқа, органикалық заттарға және pH-қа тәуелді.

Таралуға әсер ететін негізгі факторлар

pH және беттік заряд

Дисперсия бөлшектерінің ζ-потенциалы мен электростатикалық әрекеттесуі өзгеруі мүмкін.

Иондық күш

Электрлік қос қабаттың экрандалуы агрегацияны күшейтуі мүмкін; нақты эффект ортаға тәуелді.

Табиғи органикалық заттар

Гуминдік/фульвоқышқыл компоненттері бөлшектердің тұрақтылығы мен ластағыштарды байланыстыруын өзгерте алады.

Жарық, температура, уақыт

Фототрансформация мен бөлшек күйінің эволюциясы сынама алу уақытына да тәуелді.

Экологиялық әсер ету жолдары

1 **Сулы организмдер**

Балдырлар, дафниялар, балықтар: су бағанынан немесе қорекпен әсер ету.

2 **Түбіндегі организмдер**

Шөгіндіге түскен бөлшектер бентос организмдері үшін маңызды әсер ету көзі болуы мүмкін.

3 **Топырақ және микробиота**

Топырақ бөлшектерімен адсорбция, микроорганизмдерге ықпал және қоректік тізбекке өту зерттеледі.

4 **Адамға әсер ету**

Кәсіптік аэрозольдік ингаляция, тері және кездейсоқ жұту жолдары; нақты сценариймен бағаланады.

Ықтимал уыттылық механизмдері

Тотығу стрессі

ROS, липидтердің пероксидтенуі, антиоксидант жүйесінің жауаптары; жарық/дисперсия шарттарына тәуелді.

Мембрана және жасуша

Бөлшекпен жанасу, эндоцитоз, жасушалық стресс және қабыну маркерлері.

Тасымалдаушы әсер

C_{60} басқа ластағыштардың сорбциясына, тасымалына және биожетімділігіне әсер етуі мүмкін.

Тәжірибелік артефакт

Органикалық еріткіш қалдығы, қоспалар немесе тест интерференциясы көрінген уыттылықты шатастырады.

Неге ғылыми зерттеулердің қорытындылары әртүрлі?

Бірдей емес үлгілер

Таза C_{60}, nC_{60}, еріткішпен дайындалған дисперсия және функционалданған туындылар салыстыруға тікелей келмеуі мүмкін.

Әсер ету дозасы

Номинал концентрация және организмге/жасушаға жеткен доза әртүрлі болуы мүмкін.

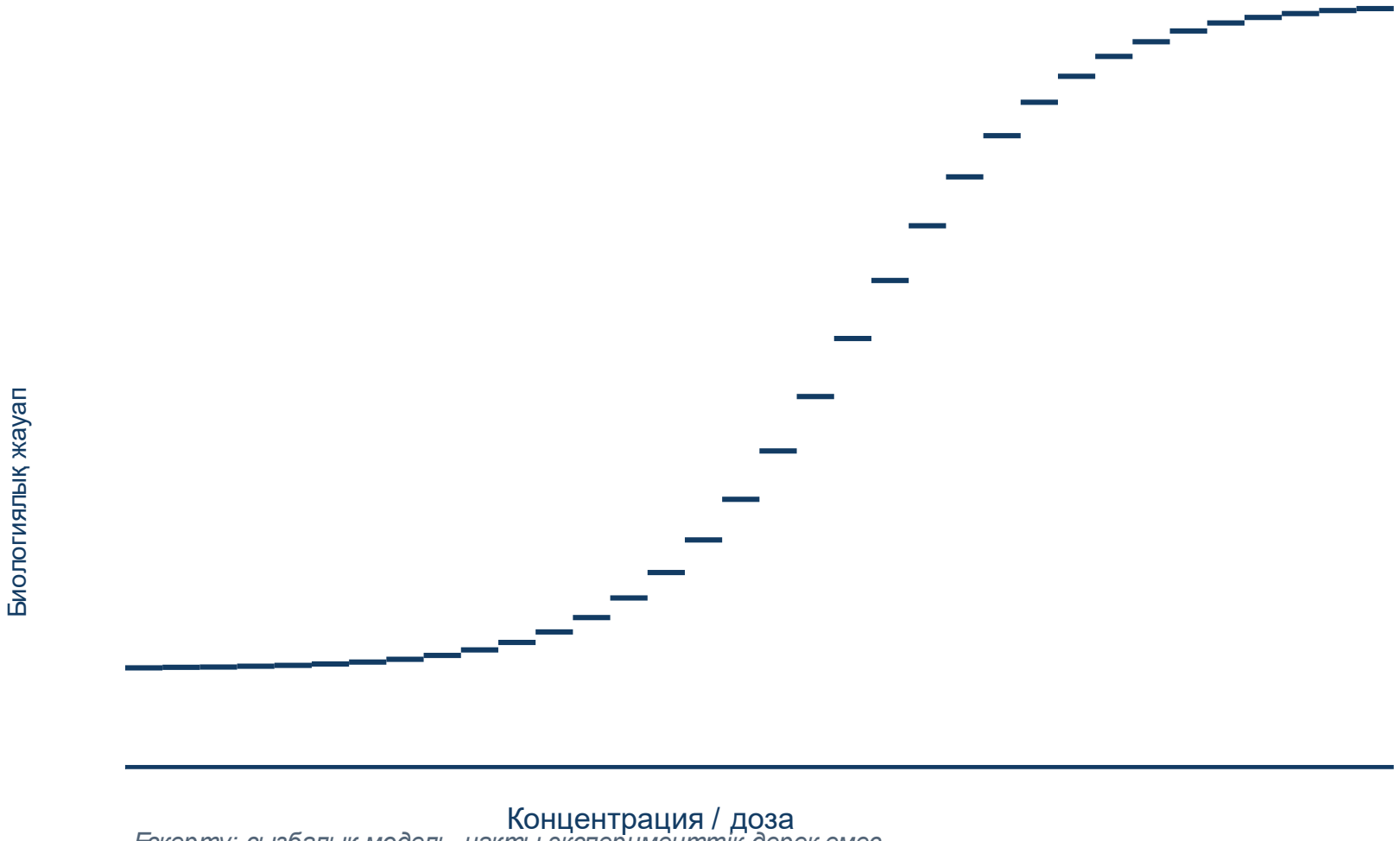
Экспозиция

Жарық, pH, тұздылық, уақыт, түр және өмірлік кезең биологиялық нәтижеге ықпал етеді.

Қарама-қайшы әдебиет

Henry және т.б. (2011) ертеректегі кейбір ROS/балық уыттылығы нәтижелеріндегі әдістемелік артефактілерді атап көрсеткен.

Доза–жауап қисығы: ұғымдық үлгі



Ескерту: сызбалық модель, нақты эксперименттік дерек емес.

Доза–жауап моделі

S-тәрізді қисық тек түсіндіру үшін берілген; EC_{50}/LC_{50} нақты тәжірибелік деректермен есептеледі.

Экотоксикологиялық көрсеткіштер

LC_{50}

Белгілі экспозиция уақытында модель организмдердің 50%-ына өлімге әкелетін концентрация.

EC_{50}

Таңдалған әсер көрсеткішінің 50%-ына сәйкес келетін концентрация; көрсеткіш анық берілуі қажет.

NOEC / LOEC

Статистикалық критериймен анықталатын әсер байқалмаған / әсер байқалған ең төмен концентрациялар.

Молекулалық маркерлер

ROS, MDA, SOD, CAT, ген экспрессиясы; олар дербес клиникалық не экожүйелік қорытынды емес.

Әртүрлі организмдерге әсерді бағалау

Модель	Көрсеткіш	Талдау әдісі	Негізгі шектеу
Балдырлар	Өсу қарқыны	Оптикалық/жасуша саны	Бөлшек жарықты шашыратады
Daphnia	Қозғалғыштық, көбею	Иммобилизация/репродукция	Дисперсияның тұрақтылығы
Балық	Даму, физиология	Эмбрион/организм сынағы	Еріткіш, доза және өмірлік кезең
Бентос	Өсу, тіршілік қабілеті	Шөгіндімен экспозиция	Шөгіндідегі нақты доза
Жасушалар	Тіршілік қабілеті, ROS	MTT, LDH, ROS тесттері	Нанобөлшек тестке кедергі келтіруі мүмкін

Мәліметтер — сынақ түрлерінің сипаттамасы; бұл кестеде тәжірибелік уыттылық мәндері берілмейді.

Фуллерендер және басқа ластағыштар

Адсорбция

Гидрофобты органикалық қосылыстар nC_{60} бетінде байланысуы мүмкін.

Тасымал

Бөлшектермен бірге ластағыштардың кеңістіктік таралуы өзгеруі мүмкін.

Биожетімділік

Байланысқан заттың организмге жетуі кейде азаюы, кейде артуы мүмкін.

Зерттеу стратегиясы

Жеке C_{60}, жеке ластағыш және қоспа үшін бөлек бақылау топтарын жасау.

Ағзаға әсер ету және биологиялық қауіпсіздік

Ингаляциялық жол

Ұнтақпен жұмыс кезінде бөлшек аэрозолін бақылау, жергілікті сорғыш және тыныс алу қорғанысы қажет болуы мүмкін.

Тері арқылы әсер

Өнім формасы, тасымалдағыш және функционалдандыруға тәуелді; жалпы «теріге өтеді» деу дұрыс емес.

Жұту арқылы әсер

Қоршаған орта/тағам тізбегі арқылы ықтимал әсер зерттеледі; дәлел деңгейін бөлек бағалау қажет.

Доза мен уақыт

Жедел және созылмалы экспозицияның қорытындыларын өзара алмастыруға болмайды.

Зерттеу сынамасын сипаттау әдістері

DLS және ζ-потенциал

Гидродинамикалық өлшем және коллоидтық тұрақтылық; үлкен агрегаттар нәтижені басым етуі мүмкін.

TEM / SEM

Бөлшек морфологиясы, агломерация; құрғату кезіндегі құрылым өзгерісін ескеру қажет.

UV–Vis, HPLC, LC–MS

C_{60} мөлшерін/тазалығын бағалау; матрицалық кедергілер мен экстракция шығымын тексеру керек.

FTIR, XPS

Беттік функционалдық топтар және тотығу күйі туралы ақпарат.

OECD негізіндегі дұрыс зерттеу алгоритмі

01

Материал

Құрамы, тазалығы, беткі топтары

02

Дисперсия

Әдісі, тұрақтылығы, pH, тұз

03

Экспозиция

Номинал және нақты доза, уақыт

04

Бағалау

Биологиялық әсер, бақылаулар

OECD (2025): материал қасиеттерін, дисперсия тұрақтылығын, дозиметрияны және әдістемені толық құжаттау қажет.

Сенімді тәжірибе үшін бақылау топтары

Топ	Мақсаты	Бақыланатын көрсеткіш
Таза орта	Фондық жауапты анықтау	Өсу / тіршілік қабілеті
Еріткіш бақылауы	Қалдық еріткіш әсерін ажырату	Еріткіш мөлшері
C_{60} үлгісі	Наноматериал әсерін анықтау	Бөлшек өлшемі және доза
Оң бақылау	Тест сезімталдығын тексеру	Белгілі тест-қосылыс
Бөлшексіз аналитикалық бақылау	Сигнал интерференциясын тексеру	Оптикалық/химиялық кедергі

Бақылау тобы нақты қолданылатын нормативтік тест әдістемесіне сәйкес жоспарланады.

Сандық бағалау: концентрация және қауіп коэффициенті

Массалық концентрация

C = m/V. Мысалы, 0,25 мг материал 0,5 л суда болса: C = 0,50 мг/л (тек есептік мысал).

Тәуекел коэффициенті

RQ = PEC/PNEC; PEC — болжамды экологиялық концентрация, PNEC — әсерсіз концентрацияға негізделген бағалау.

Есептеу үлгісі

PEC = 0,02 мкг/л, PNEC = 0,20 мкг/л болса, RQ = 0,10. Бұл мәндер оқу мысалы, нақты фуллеренге тән норма емес.

Шектеу

PNEC шығаруға жеткілікті сапалы экотоксикологиялық дерек және белгісіздік коэффициенті қажет.

Наноматериал қауіп-қатерін бағалау

Қауіп факторы (hazard)

Белгілі концентрация мен жағдайдағы жағымсыз әсердің ықтималдығы мен ауырлығы.

Әсер ету (exposure)

Шығарынды мөлшері, ортада таралуы, нақты контактісі және экспозиция ұзақтығы.

Тәуекел (risk)

Қауіпті қасиет пен нақты әсер ету сценарийін біріккен түрде бағалау.

Белгісіздік

Пішін, функционалдандыру, экожүйе, созылмалы әсер және нақты өмірлік концентрациялар бойынша дерек тапшылығы.

Зертхана және өндіріс қауіпсіздігі

Инженерлік бақылау

Жабық жүйе, жергілікті сорғыш желдеткіш, шаң бөлінуін азайту.

Жеке қорғаныс

Қолғап, көзілдірік және тәуекел бағалауына сай респиратор; тиісті еңбек қауіпсіздігі тәртібі.

Қалдықты басқару

Наноматериал бар ерітінді, сүзгі, майлық және ұнтақты белгіленген қалдық ағынында жинау.

Құжаттама

SDS, үлгі журналы, шикізат партиясы, дисперсия әдісі және төгілуге әрекет ету нұсқаулығы.

Заманауи зерттеудің ашық мәселелері

1 **Нақты ортаға сәйкестік**

Лабораториялық жоғары концентрациядан қоршаған ортадағы төмен экспозицияға тікелей көшуге болмайды.

2 **Шөгінді және қоректік тізбек**

Ұзақ мерзімді тағдыр, бентосқа әсер және трофикалық тасымал бойынша деректерді толықтыру қажет.

3 **Қоспалық әсер**

PFAS, металдар, органикалық ластағыштармен өзара әрекеттесудің механизмдері жағдайға тәуелді.

4 **Стандарттау**

Бөлшек қасиеттері, нақты доза және тест интерференцияларын келісілген түрде есепке алу басты талап.

Қорытынды: бес негізгі тұжырым

1

1. Құрылым–қасиет байланысы

C_{60}, nC_{60} және функционалданған туындылардың экологиялық мінез-құлқы әртүрлі.

2

2. Орта факторлары

Иондық күш, органикалық заттар, жарық және агрегат өлшемі тасымалдану мен биожетімділікті өзгертеді.

3

3. Биологиялық әсер

Уыттылық жағдайға тәуелді; жеке зерттеуді барлық фуллеренге жалпылауға болмайды.

4

4. Дұрыс эксперимент

Тазалық, еріткіш бақылауы, дисперсия, нақты доза және аналитикалық интерференция міндетті түрде тексеріледі.

5

5. Қауіп-қатер

Экологиялық қауіп нақты шығарынды мен әсер ету деректерін ескеріп бағаланады.

ғылыми әдебиеттер және нормативтік ұсынымдар

1. Lan X. et al. (2026). Behavior and Toxicity of Buckminsterfullerene (C60) in Aquatic Environments. Environmental Research. DOI: 10.1016/j.envres.2026.125976

2. Trpkovic A. et al. (2012). Toxicity of pristine versus functionalized fullerenes. Archives of Toxicology. DOI: 10.1007/s00204-012-0859-6

3. Henry T.B. et al. (2011). Aqueous fullerene aggregates (nC60) generate minimal ROS. Current Opinion in Biotechnology. DOI: 10.1016/j.copbio.2011.05.511

4. OECD (2025). Guidance on Sample Preparation and Dosimetry for Manufactured Nanomaterials. DOI: 10.1787/87ec4ecc-en

5. OECD (2020). Guidance on Dissolution and Dispersion Stability of Nanomaterials. DOI: 10.1787/f0539ec5-en

6. An Update Report on the Biosafety and Potential Toxicity of Fullerene-Based Nanomaterials toward Aquatic Animals (2021). DOI: 10.1155/2021/7995223