**ОСОБЕННОСТИ ПОВЕДЕНИЯ ФУЛЛЕРЕНА С60 В ВОДНОМ РАСТВОРЕ
В ПРИСУТСТВИИ МОЛЕКУЛ КОФЕИНА И КОФЕИН-БЕНЗОАТА НАТРИЯ**

**Минтяк А.Ю., Головченко И.В.**

Севастопольский государственный университет

*ул. Университетская, 33, г. Севастополь, 299053, РФ; e-mail: golovchenko.igor1991@gmail.com*

**Аннотация.** В работе рассматривается поведение фуллерена С60 при титровании в водном растворе кофеином. С помощью методов ИК-спектроскопии и кондуктометрии показано, что молекулы фуллерена C60 образуют комплексы с лигандами кофеина, о чём свидетельствуют изменения на ИК-спектрах в области ароматических связей, а также отличие проводимости смеси от суммарной проводимости растворов отдельных компонентов при тех же концентрация, что и в растворе…. **(150-250 слов)**

***Ключевые слова:*** *фуллерен C60, кофеин, водный раствор, агрегация.*

В настоящее время одним из наиболее широко используемых методов в терапии различного рода патологий является комбинированное использование препаратов, целью которого является снижение негативных последствий от приёма активного вещества, или изменение его физико-химических свойств: растворимости, сродства и др. Нельзя преуменьшать важность и синтеза новых веществ, но данный метод требует намного больших затрат ресурсов, в том числе и временных. В связи с этим крайне важным является выявление природы механизмов совместного действия препаратов.

….

…….

……….

Посредством кондуктометра Profiline Cond 3110 WTW были получены значения электропроводности σ с помощью кондуктометрического титрования для водных растворов лигандов.

В рамках кондуктометрического титрования была получена удельная электропроводность σуд при различных концентрациях для водных растворов кофеина [1] и кофеин-бензоата натрия. Значения удельной проводимости для кофеина получились сравнительно небольшими. Связано это с тем, что кофеин не диссоциирует на ионы. Исходя из этого, был сделан вывод, что изменение удельной проводимости связано с взаимодействием кофеина с растворителем. В качестве верификации в дальнейшем можно получить зависимость pH от концентрации кофеина и проследить корреляцию проводимости с концентрацией ионов воды. Уменьшение удельной проводимости раствора в связи с вышеуказанным предположением было решено связать с уменьшением удельной SASA. Полученные зависимости приведены на рисунке 1.

|  |  |
| --- | --- |
| а) |  |
| б) |  |

**Рисунок 1.** Зависимости удельной электропроводности водных растворов кофеина (а) и кофеин-бензоата натрия (б) от концентрации, полученные путем кондуктометрического титрования

На малых концентрациях водных растворов кофеина и кофеин-бензоата натрия исследовалось комплексообразование с водным раствором фуллерена С60 [2] посредством метода кондуктометрии. Были сняты значения электропроводности на различных концентрациях водных растворов кофеина и кофеин-бензоата натрия в присутствии и отсутствии фуллерена С60; данные приведены в таблице 1.

 **Таблица 1.** Значения электропроводности водных растворов кофеина и кофеин-бензоата натрия в присутствии и отсутствии фуллерена С60

|  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- |
| С60 | Кофеин | Кофеин + С60 | Кофеин-бензоат натрия | Кофеин-бензоат натрия + С60 |
| σ, мкСм/см | С, ммоль | σ, мкСм/см | С, ммоль | σ, мкСм/см | С, ммоль | σ, мкСм/см | С, ммоль | σ, мкСм/см |
| 2,9 | 0,16 | 3 | 0,1 | 38,4 | 0,1 | 38,4 | 0,1 | 38,1 |
| 0,4 | 3,6 | 0,4 | 58,5 | 0,4 | 58,5 | 0,4 | 48,3 |
| 0,7 | 3,5 | 0,7 | 88,2 | 0,7 | 88,2 | 0,7 | 85,4 |

Исходя из полученных зависимостей можно сделать вывод, что проводимость в растворе смеси фуллерена С60 с каждым из лигандов меньше, чем суммарная проводимость чистых растворов фуллерена и лигандов при тех же концентрациях, что и в смеси:

$σ\_{mix}<σ\_{C\_{60}}+σ\_{l},$ (1)

где *σmix*$σ\_{mix}$ – проводимость водного раствора смеси фуллерена С60 и лиганда; *σ60*$σ\_{C\_{60}}$ – проводимость водного раствора чистого фуллерена С60; *σl* – проводимость водного раствора чистого лиганда.

Полученные зависимости позволяют сделать вывод о наличии процессов агрегации и взаимодействия лигандов с молекулами растворителя.

***Список литературы / References:***

1. Перельман Я.М. *Анализ лекарственных форм. Практическое руководство*. Л.: Медгиз, 1961, 616 с. [Perelman Ya.M. *Analysis of dosage forms. Practical Guide.* L.: Medgiz, 1961, 616 p. (In Russ.)]
2. Prylutskyy Y.I., Vereshchaka I.V., Maznychenko A.V., Bulgakova N.V., Gonchar O.O., Kyzyma O.A.,
Ritter U., Scharff P., Tomiak T., Nozdrenko D.M., Mishchenko I.V., Kostyukov A.I. C60 fullerene as promising therapeutic agent for correcting and preventing skeletal muscle fatigue. *Journal of Nanobiotechnology*, 2017, vol. 15, no. 8, DOI: 10.1186/s12951-016-0246-1

**PECULIARITIES OF FULLERENE C60 BEHAVIOR IN AN AQUEOUS SOLUTION
IN THE PRESENCE OF CAFFEINE MOLECULES**

**Mintyak A.Yu., Golovchenko I.V.**

Sevastopol State University

*Universitetskaya str., 33, Sevastopol, 299053, Russia; e-mail: golovchenko.igor1991@gmail.com*

**Abstract.** The behavior of fullerene C60 in aqueous solution while titrated by caffeine is observed. By means of IR-spectroscopy and conductometry it is shown, that fullerene C60 aggregates with caffeine ligands, as evidenced of changes in aromatic region in IR-spectra and by difference in conductivities of mixture and solutions of separate components with the same concentration… **(150-250 слов)**

***Key word:*** *fullerene C60, caffeine, aqueous solution, aggregation.*