

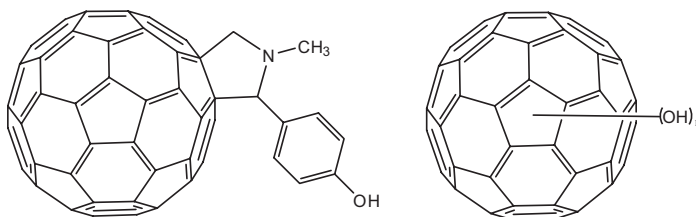
## EKSPERYMENTALNE I TEORETYCZNE BADANIE WŁAŚCIWOŚCI PRZECIWUTLENIAJĄCYCH POCHODNYCH FULERENU.

**Robert Czochara, Justyna Nyc, Elżbieta Megiel, Grzegorz Litwinienko**

Uniwersytet Warszawski, Wydział Chemii,  
ul. Pasteura 1, 02-093 Warszawa, rczochara@chem.uw.edu.pl

Na Wydziale Chemii Uniwersytetu Warszawskiego prowadzone są badania kinetyki autooksydacji związków organicznych oraz mechanizmu działania i aktywności antyoksydantów naturalnych. Podejmowane są także próby otrzymania nowych antyoksydantów. Jedną z takich prób jest synteza antyoksydantów hybrydowych, złożonych z cząsteczki fulerenu  $C_{60}$  połączonej kowalencyjnie z antyoksydantem fenolowym lub aminowym (ang. *chain breaking antioxidant*). Otrzymane w ten sposób pochodne będą wykazywały połączone właściwości przeciwutleniające fulerenów (nazywanych „gąbkami rodnikowymi”, ang. *radical sponges*) z właściwościami pochodnych fenolowych i aminowych.

W prezentowanej pracy przedstawiono syntezy pochodnych fulerenu o strukturze zaprezentowanej na Rysunku 1. Zbadany został proces utleniania kwasu linolenowego za pomocą skaningowej kalorymetrii różnicowej (DSC). Zarejestrowano krzywe kalorymetryczne termooksydacji przy różnych szybkościach grzania  $\beta = 2,5 - 20 \text{ K min}^{-1}$ , wyznaczając dla każdego  $\beta$  początkową temperaturę utleniania ( $T_0$ ). Korzystając z metody Ozawy-Flynn-Walla wyznaczono parametry kinetyczne tj.: energię aktywacji ( $E_a$ ) i współczynnik przedwykładniczy ( $Z$ ), a następnie z równania Arrheniusa, globalną stałą szybkości utleniania ( $k$ ) [1].



Rysunek 1. Otrzymane pochodne fulerenu  $C_{60}$

Właściwości antyoksydacyjne fulerenoli zbadano za pomocą techniki Zatrzymanego Przepływu (ang. *Stopped Flow*). Pomiar polegał na rejestrowaniu zaniku absorbancji przy długości fali 517 nm (maksimum absorpcji rodnika  $\text{dpph}\cdot$ ) w temp.  $23^\circ\text{C}$ .

Odrębnym nurtem badań było wykonanie obliczeń teoretycznych dla  $C_{60}$  oraz serii pochodnych o wzorze ogólnym  $C_{60}(\text{OH})_x$  (gdzie  $x=1,2,4,6$ ). Dla wszystkich związków wyznaczono powinowactwo elektronowe (ang. *Electron Affinity* - EA) oraz energię jonizacji (ang. *Ionization Potential* - IP). Dodatkowo, dla fulerenoli policzono entalpię dysocjacji wiązań O-H (ang. *Bond Dissociation Enthalpy* - BDE) [2].

[1] M. Musialik, G. Litwinienko *J. Therm. Anal. Calorim.*, **2007**, 88, 781–785.

[2] E. Lewars *Computational Chemistry*, Kluwer Academic Publishers, London, 2004.