

УДК 574:539.1.04

**КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОЕ ПРОЕКТИРОВАНИЕ
ЭНДОЭДРИЧЕСКИХ ИНДИЙСОДЕРЖАЩИХ ПРОИЗВОДНЫХ
БАКМИНСТЕРФУЛЛЕРЕНОВ C_{60} И C_{70} ДЛЯ РАЗРАБОТКИ
РАДИОНУКЛИДНЫХ НАНОРАЗМЕРНЫХ АГЕНТОВ-
ИСТРЕБИТЕЛЕЙ ОПУХОЛЕВЫХ НОВООБРАЗОВАНИЙ**

Е.А. Дикусар¹, В.М. Зеленковский¹, А.Л. Пушкарчук¹, В.И. Поткин¹,
Д.А. Рудаков¹, С.Я. Килин², А.Г. Солдатов³, С.А. Кутень⁴,
А.Н. Хмелевский⁵, Л.Ф. Бабичев⁵

¹Институт физико-органической химии НАН Беларуси
Республика Беларусь, 220072, Минск, ул. Сурганова, 13
dikusar@ifoch.bas-net.by

²Институт физики им. Б.И. Степанова НАН Беларуси
Республика Беларусь, 220072, Минск, пр-т Независимости, 68

³НПЦ НАН Беларуси по материаловедению
Республика Беларусь, 220072, Минск, ул. П. Бровки, 19

⁴Институт ядерных проблем БГУ
Республика Беларусь, 220030, Минск, ул. Бобруйская, 11

⁵Объединенный институт энергетических и ядерных исследований
НАН Беларуси – Сосны
Республика Беларусь, 220109, Минск, ул. академика А.К. Красина, 99

Аннотация: В данной работе проведено моделирование электронной структуры и строения эндоэдрических индийсодержащих бакминстерфуллеренов C_{60} и C_{70} и моноэфира – производного гетероциклической карбоновой кислоты.

Ключевые слова: моделирование электронной структуры, эндоэдрические индийсодержащие бакминстерфуллерены, агенты-истребители опухолевых новообразований.

В мировую практику клинической онкологии интенсивно внедряются новые современные технологии лечения опухолевых заболеваний – молярная (радиологическое уничтожение новообразований с помощью введения соответствующих короткоживущих радионуклидов), бинарная (или нейтронозахватная) – эта технология разработана для избирательного воздействия на злокачественные новообразования и использует тропные к опухолям препараты, содержащие нерадиоактивные нуклиды (B^{10} , Cd^{113} , Gd^{157} и др.), которые, поглощая тепловые нейтроны, способны генерировать вторичное α -излучение, губительное для целевых опухолевых клеток-мишеней и достаточно безопасное для нормальных, здоровых органов и тканей и триадная – последовательное введение в организм комбинации из двух и более, по отдельности неактивных и безвредных компонентов, тропных к опухолевым тканям и способным в них селективно накапливаться, вступать друг с другом в химическое

взаимодействие и уничтожать опухолевые новообразования под действием слабых сенсibiliзирующих внешних воздействий или излучений.

Применение соединений бора для борнейтронозахватной терапии онкологических заболеваний было впервые предложено Locher G.L. еще в 1936 году [1,2], при которой тепловые нейтроны улавливаются ядрами ^{10}B . Захват нейтронов приводит к образованию возбужденного ядра ^{11}B , которое расщепляется до высокоэнергичных ионов $^4\text{He}^{2+}$ и $^7\text{Li}^{3+}$. Гибель опухолевой клетки вызывается высвобождением этих заряженных частиц, которые создают ионизированные треки вдоль своих траекторий, приводящие к повреждению клетки.

Еще одним направлением по разработке кластерных агентов, специфически сорбирующихся и накапливающихся в опухолевых клетках, необходимых для диагностики и лечения рака, является синтез производных карборанов [3-6] и эндоэдрических элементосодержащих, в том числе радионуклидосодержащих (Y^{90} , Zr^{95} , Fe^{59} , Eu^{147} , Eu^{148} , Eu^{155} , Tm^{170} , Rn^{222} , U^{230} , Pu^{237} , Cm^{240} , Cm^{241} , Es^{253}) бакминсерфуллеренов [7-28]. Является перспективным изучение, в том числе и методом квантово-химического моделирования, возможности применения и других нуклидов и радионуклидов для диагностики и терапии онкологических заболеваний. В данной работе представлены результаты квантово-химического проектирования эндоэдрических индийсодержащих производных бакминстерфуллеренов C_{60} и C_{70} для разработки радионуклидных наноразмерных агентов-истребителей опухолевых новообразований (см. рис. 1).

Природный индий (^{49}In) состоит из двух изотопов с массовым числом In^{113} (4,23%) и In^{115} (95,77%). Последний изотоп (In^{115}) обнаруживает очень слабую β -радиоактивность ($T_{1/2} = 6 \cdot 10^{14}$ лет, энергия распада 0,63 МэВ, конечный продукт распада – стабильный изотоп олова Sn^{115}). Поперечное сечение захвата тепловых нейтронов – 190 барн/атом. Из искусственных радиоактивных изотопов индия наиболее важен In^{114*} ($T_{1/2} = 49$ дням, энергия распада 0,191 МэВ, характер распада – изомерный переход и самопроизвольное деление). Энергия распада равна $1,642290 \pm 0,00300015$ МэВ для перехода в Sn^{114} ; энергия распада для изомерного перехода составляет $0,1902900 \pm 0,00003$ МэВ). Кроме самого изотопа In^{114*} имеется еще 2 его возбужденных состояния, их каналы распада следующие: с испусканием электрона (99,5%) и переходом в Sn^{114} , и с испусканием позитрона (0,5%) и переходом в Cd^{114} . Энергия распада $1,988700 \pm 0,0007$ МэВ по каналу Sn^{114} и $1,452000 \pm 0,003$ МэВ по каналу Cd^{114} [29-39]. Для получения эндоэдрических In^{114*} -содержащих производных

бакминстерфуллеренов C_{60} и C_{70} (**1-12**), была разработана и используется следующая схема синтеза, основанная на электродуговом методе получения эндоэдрических соединений (**1, 2**). Содержание этих соединений (**1, 2**) в саже, полученной действием электродугового разряда с использованием графитовых электродов (C_n) в присутствии эндоэдрического компонента включения (In) обычно не превышает 1–2% [40], и для получения их в индивидуальном состоянии применяют высокоэффективную препаративную жидкостную хроматографию [41]. Последующей химической модификацией (**1, 2**) путем бромирования и щелочного гидролиза полученных бромидов (**3, 5**) предполагается синтезировать полигидроксилсодержащие производные эндоэдрических бакминстерфуллеренов C_{60} и C_{70} (**4, 6**) [42-46]. Дальнейшая этерификация полиспиртов (**4, 6**) хлорангидами гетероциклических карбоновых кислот [47-50] позволит получить целевые соединения (**7-12**) – перспективные соединения для разработки на их основе агентов для диагностики и терапии онкологических заболеваний [1, 2, 46, 51-53], тем более, что интерес к соединениям In связан с использованием его γ -активного изотопа In^{111} ($E_\gamma = 173,247$ КэВ, $T_{1/2} = 2,81$ сут.) в качестве радиоактивных меток в моноклональных антителах для диагностики онкологических заболеваний [52,53].

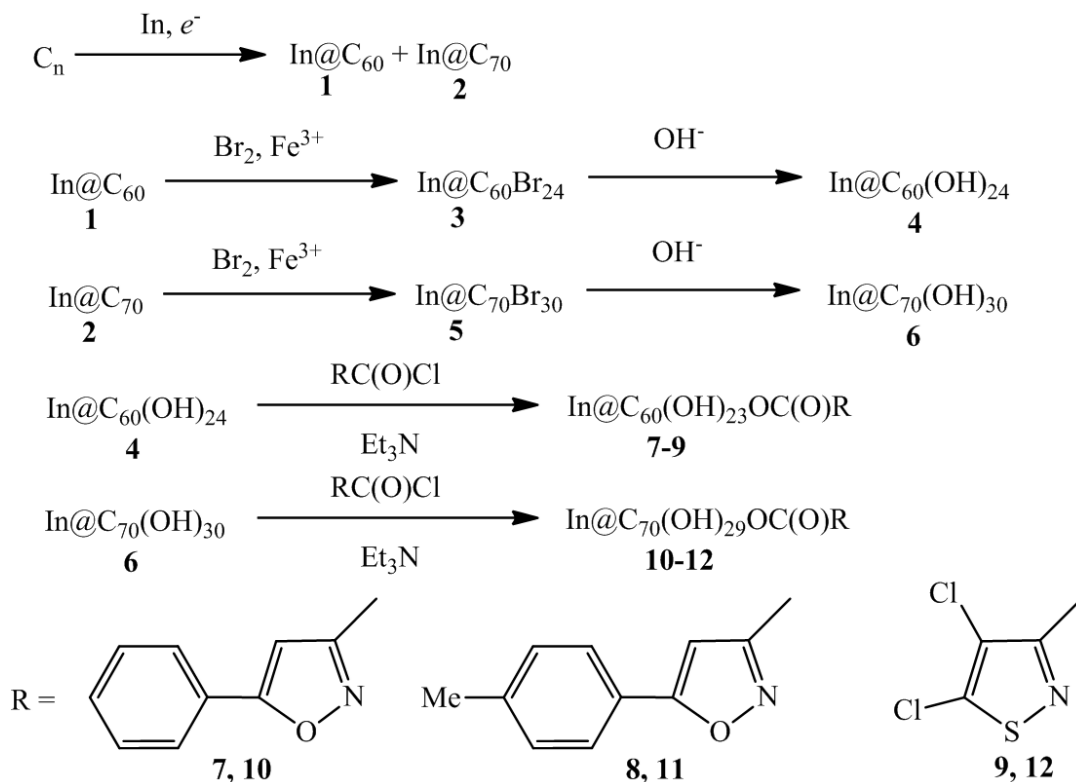


Рис. 1. Предполагаемая схема получения радионуклидных агентов-истребителей опухолевых новообразований.

В настоящей работе проведено моделирование электронной структуры и строения эндоэдрических индийсодержащих бакминстерфуллеренов C_{60} и C_{70} (**1**, **2**) и моноэфира – производного гетероциклической карбоновой кислоты (**7**). Для сравнения также было проведено моделирование аналогичных, не содержащих эндоэдрических объектов включения, т.е. соответствующих «пустых» бакминстерфуллеренов C_{60} и C_{70} и их производных (**1a**, **2a**, **7a**). Были проведены неэмпирические квантово-химические расчеты этих соединений с использованием метода DFT с применением уровня теории B3LYP/MIDI по программе GAMESS [54]. Полные энергии систем вычисленные методом DFT для атома индия (*In*) и соединений (**1**, **1a**, **2**, **2a**, **7a**), энергии ВЗМО, НВМО и дипольные моменты, приведены в Таблице 1. Структуры исходных полигидроксилсодержащих кластеров $C_{60}(OH)_{24}$ (**4a**) и $C_{70}(OH)_{30}$ (**6a**) взяты с учетом данных, приведенных в работах [55-58].

Таблица 1. Полные энергии систем (E , *a.e.*) атома индия (*In*) и соединений (**1**, **1a**, **2**, **2a**, **7a**), энергии ВЗМО ($E_{ВЗМО}$, *a.e.*) и НВМО ($E_{НВМО}$, *a.e.*), и дипольные моменты (D , Дб), вычисленные методом DFT (B3LYP/MIDI)

№	E	$E_{ВЗМО}$	$E_{НВМО}$	D
<i>In</i>	-5721,1470285054	-0,0659	0,0020	0
1	-7979,2010053461	-0,1012	-0,0125	0,01
1a	-2258,0630374274	-0,3025	-0,0213	0
2	-8355,6760622022	-0,1126	-0,0085	1,61
2a	-2634,5215754359	-0,3025	-0,0213	0
7a	-4639,9546459377	-0,2942	0,0172	12,18

Из данных квантово-химических расчетов следует (см. таблицу 2), что энергия связывания (E_{bind}) эндоэдрических кластеров (**1**, **2**), полученная по формуле:

$$E_{bind} = E_{(1,2...12)} - [E_{(In)} + E_{(1a,2a...12a)}]$$

Таблица 2. Энергия связывания индийсодержащих эндоэдрических кластеров (**1**, **2**)

№	E_{bind} , <i>a.e.</i>	E_{bind} , кДж/моль
1	0,0090605867	23,76
2	-0,0074582609	-19,56

Из данных квантово-химических расчетов следует, что в эндокластерах (**1**, **2**) происходит переход 1 электрона от эндоэдрического

металла (In) на НВМО бакминстерфуллеренов C_{60} и C_{70} с образованием ионов $(In^+)[@C_n]^{-1}$, что согласуется с данными работ [7-9, 40, 59, 60]. Этот электрон попадает в зону проводимости бакминстерфуллереновых кластеров C_{60} и C_{70} , образованную трижды вырожденными их (t_{1U}) π – орбиталями [61].

Появление у эндоэдральных металлобакминстерфуллеренов (**1, 2**) постоянного дипольного момента придает кластерам на основе этих соединений особые свойства, связанные с возможной изотропной ориентацией их молекул в квазикристаллах и возникновением постоянной поляризуемости. Такие квазикристаллы должны обладать сегнетоэлектрическими свойствами и могут найти применение в электронных устройствах. Перестройка электронной структуры эндоэдральных металлобакминстерфуллеренов (**1, 2**), связанная с переходом валентных электронов металла на внешнюю по отношению к оболочке область, отражается на таких электронных характеристиках молекулы бакминстерфуллерена, как ее потенциал ионизации и сродство к электрону. Это можно проиллюстрировать результатами квантово-химических расчетов, представленными в Таблице 1. Эндоэдральное инкапсулирование атома In в молекулу фуллерена, с одной стороны, приводит к снижению потенциала ионизации, с другой стороны, энергия сродства к электрону у эндоэдральных бакминстерфуллеренов заметно выше, чем у «пустых» фуллеренов (**1a, 2a**). Основные отличия эндоэдральных металлофуллеренов (**1, 2**) от полых фуллереновых молекул (**1a, 2a**) связаны с двумя главными особенностями их структуры: нецентральным положением инкапсулированного атома металла (In) в клетке бакминстерфуллеренового нанокластера (**1, 2**), вследствие чего молекула эндоэдрального бакминстерфуллерена имеет постоянный дипольный момент, наличие которого сказывается на макроскопических характеристиках соответствующих фуллеритов; потенциал взаимодействия молекул, обладающих дипольным моментом, не является сферически симметричным, поэтому составленный из таких молекул квазикристалл должен обладать сильно выраженными анизотропными свойствами. Другая особенность эндоэдральных металлофуллеренов (**1, 2**) связана с зарядовым состоянием инкапсулированного атома (In) и с переходом валентных электронов от этого атома на внешнюю поверхность молекулы бакминстерфуллерена [40,60]. Наличие электронов на наружной поверхности бакминстерфуллереновой оболочки определяет характер межмолекулярного взаимодействия в квазикристалле, в которое наряду с Ван-дер-Ваальсовым, вносит определенный вклад и электростатический механизм [8,40]. Постоянный дипольный момент молекул эндоэдральных металлобакминстерфуллеренов (**1, 2**) обуславливает несферический

характер их взаимодействия между собой. Это, в свою очередь, способствует образованию протяженных квазиструктур (ансамблей и агрегатов), содержащих некоторое количество подобных молекул, которое должно сохраняться не только в квазикристаллическом состоянии, но и в растворах.

Библиографический список:

1. **Hosmane, N.S.** Boron and Gadolinium Neutron Capture Therapy for Cancer Treatment / N.S. Hosmane, J.A. Maquire, Y. Zhu. – World Scientific Publishing Co. Pte. Ltd., 2012. – 300 p.
2. **Котенко, К.В.** Перспективы использования бинарных технологий в медицине / К.В. Котенко, В.Ю. Соловьев, А.Ю. Бушманов, В.А. Перминова // Медицинская радиобиологии и радиационная безопасность. – 2012. – Т. 57. – № 3. – С. 66-67.
3. **Рудаков, Д.А.** Синтез и химические свойства карборанов. Дикарбаундекарбораны, металло- и металакарбораны, азометины, сложные эфиры, пероксиды, соли карборанкарбоновых кислот / Д.А. Рудаков, Е.А. Дикусар, З.П. Зубрейчук. – Saarbrücken, Deutschland: LAP LAMBERT Academic Publishing / OmniScriptum GmbH & Co. KG, 2013. – 436 с.
4. **Дикусар, Е.А.** Разработка и квантово-химическое моделирование агентов для бор-нейтронозахватной диагностики и терапии онкологических заболеваний – холестерина эфиров карборан-С-карбоновых кислот / Е.А. Дикусар, А.Л. Пушкарчук, В.М. Зеленковский, В.И. Поткин, Д.А. Рудаков, С.Г. Стёпин // Вестник фармации. – 2013. – № 1-58. – С. 20-23.
5. **Дикусар, Е.А.** Производные карборанов в качестве агентов БНЗ-терапии / Е.А. Дикусар, В.М. Зеленковский, Д.А. Рудаков, А.В. Клецков, А.Л. Пушкарчук, А.Г. Солдатов // Химия, структура и функции биомолекул. IV Международная научная конференция, посвященная 100-летию со дня рождения академика А.А. Ахрема: Тезисы докладов, Минск (17-19 октября 2012). – Минск: Институте биоорганической химии НАН Беларуси, 2012. – С. 99.
6. **Дикусар, Е.А.** Холестериновые эфиры карборанкарбоновых кислот в качестве агентов бор-нейтронозахватной терапии опухолевых заболеваний – синтез и квантово-химическое моделирование / Е.А. Дикусар, В.И. Поткин, А.Л. Пушкарчук, В.М. Зеленковский, Д.А. Рудаков, С.А. Кутень // I Международная Интернет-конференция: На стыке наук. Физико-химическая серия: Сборник трудов, Казань (24-25 января 2013). – Казань: Изд-во Казанского (Приволжского) федерального ун-та, 2013. – С. 81-82.
7. **Дикусар, Е.А.** Квантовохимическое моделирование эндоэдрических производных бакминстерфуллеренов $Gd@C_{60}(CHR)_2$ и $Gd@C_{80}(CHR)_2$ / Е.А. Дикусар, В.М. Зеленковский, В.И. Поткин, А.А. Юдин // Теоретическая и экспериментальная химия. – 2010. – Т. 46. – № 4. – С. 208-211.
8. **Дикусар, Е.А.** Квантово-химическое моделирование процесса образования цвиттер-ионов у эндоэдрических производных бакминстерфуллеренов $1,2-(NH_3)@C_{180}(HR)$, $1,2-(NH_3)@C_{240}(HR)$ и $1,2-(NH_3)@C_{540}(HR)$ / Е.А. Дикусар, В.М. Зеленковский, В.И. Поткин // Фуллерены и наноструктуры в

конденсированных средах: сб. науч. ст. / редкол.: П.А. Витязь (отв. ред.) [и др.]. – Минск: Изд. центр БГУ, 2011. – С. 56-61.

9. **Дикусар, Е.А.** Квантово-химические расчеты структур металлофуллеренов / Е.А. Дикусар, В.М. Зеленковский, В.И. Поткин, Д.А. Рудаков // Химические реактивы, реагенты и процессы малотоннажной химии: сб. науч. тр. / Нац. акад. наук Беларуси, Ин-т химии новых материалов; науч. ред. В.Е. Агабеков, Е.В. Королева, К.Н. Гусак. – Минск: Беларус. навука, 2011. – С. 133-140.

10. **Дикусар, Е.А.** Оценка возможности использования эндоэдрических радон²²²-содержащих производных бакминстерфуллеренов C_{60} и C_{80} в качестве нанороботов-истребителей опухолевых новообразований / Е.А. Дикусар, В.М. Зеленковский, А.Л. Пушкарчук, В.И. Поткин, Д.А. Рудаков, А.Г. Солдатов, А.В. Холопцев, С.Г. Стёпин // Вестник фармации. – 2012. – № 4-58. – С. 102-105.

11. **Дикусар, Е.А.** Оценка возможности использования эндоэдрических радон-222-содержащих производных бакминстерфуллеренов C_{60} и C_{80} в качестве нанороботов – истребителей опухолевых новообразований / Е.А. Дикусар, В.М. Зеленковский, А.Л. Пушкарчук, Д.А. Рудаков, С.Я. Килин, А.Г. Солдатов, А.В. Холопцев, Г.Ф. Батраков // Медицинские новости. – 2013. – № 3 (222). – С. 11-12.

12. **Дикусар, Е.А.** Эндоэдрические радон-222-содержащие производные бакминстерфуллеренов C_{60} и C_{80} / Е.А. Дикусар, В.М. Зеленковский, А.Л. Пушкарчук, В.И. Поткин, Д.А. Рудаков, А.Г. Солдатов, А.В. Холопцев // Углеродные наночастицы в конденсированных средах: сборник научных статей. – Минск: Институт тепло- и массообмена им. А.В. Лыкова, 2013. – С. 246-250.

13. **Рудаков, Д.А.** Квантово-химическое моделирование холестериновых эфиров *o*-, *m*- и *p*-карборан-*C*-карбоновых кислот и фуллереновых эндокластеров / Д.А. Рудаков, Е.А. Дикусар, А.Л. Пушкарчук, В.М. Зеленковский, В.И. Поткин // Материалы VI Всероссийской молодежной школы-конференции «Квантово-химические расчеты: структура и реакционная способность органических и неорганических молекул»: Сборник статей, Иваново (30 сентября – 4 октября 2013). – Иваново: ИГХТУ, 2013. – С. 270-274.

14. **Дикусар, Е.А.** Квантово-химическое проектирование радионуклидных агентов для диагностики и терапии опухолевых новообразований / Е.А. Дикусар, В.М. Зеленковский, А.Л. Пушкарчук, Д.А. Рудаков, А.Г. Солдатов, С.А. Кутень // Вестник ТвГУ. Серия «Физика». – 2013. – № 39. – Вып. 21. – С. 69-81.

15. **Dikusar, E.A.** Quantum-Chemistry Projecting of the Radio-Nuclide Carborane and Fullerene Nano-Cluster Agents for Diagnostics and Therapy of Oncological Diseases / E.A. Dikusar, V.M. Zelenkovski, V.I. Potkin, D.A. Rudakov, S.A. Kuten, A.G. Soldatov // Proceedings of International Conference Nanomeeting – 2013. Physics, Chemistry and Application of Nanostructures: Reviews and Short Notes, Minsk, Belarus (24-27 May 2013). –Singapore: World Scientific 2013. – P. 324-327.

16. **Дикусар, Е.А.** Эндоэдрические радон-222 содержащие производные бакминстерфуллеренов C_{60} и C_{80} в качестве нанороботов-истребителей опухолевых новообразований / Е.А. Дикусар // Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов: межвуз. сб. науч. тр. / под общей редакцией В.М. Самсонова, Н.Ю. Сдобнякова. – Тверь: Твер. гос. ун-т, 2012. – Вып. 4. – С. 80-84.

17. **Бей, М.П.** Адамантановые и карборановые аналоги фуллереновых нанокластеров / М.П. Бей, Е.А. Дикусар, В.И. Поткин, А.П. Ювченко, В.М. Зеленковский // XI International Conference «Hydrogen Materials Science and Chemistry of Carbon

Nanomaterials (ICHMS'2009)): Conference Book, Yalta, Crimea, Ukraine (25-31 August 2009). – Kiev: ANEU, 2009. – С. 384-387.

18. **Дикусар, Е.А.** Квантово-химические расчеты производных фуллереновых нанокластеров, содержащих супрамолекулярные объекты / Е.А. Дикусар, В.М. Зеленковский, А.А. Юдин // Международная научная конференция «Физико-химические основы формирования и модификации микро- и наноструктур (ФММН'2009)»: Сборник научных трудов, Харьков, Украина (21-23 октября 2009). – Харьков: НФТЦ МОН и НАН Украины, 2009. – С. 334-337.

19. **Дикусар, Е.А.** Квантово-химическое исследование металлосодержащих производных фуллеренов / Е.А. Дикусар, А.А. Юдин, В.М. Зеленковский, В.И. Поткин, Д.А. Рудаков // Химические реактивы, реагенты и процессы малотоннажной химии (XXIII Международной научно-технической конференции «РЕАКТИВ-2010»): Тезисы докладов, Минск, Беларусь (27-29 октября 2010). – Минск: Институт химии новых материалов НАН Беларуси, 2010. – С. 47.

20. **Дикусар, Е.А.** Металлосодержащие производные фуллеренов и карборанов / Е.А. Дикусар, В.М. Зеленковский, В.И. Поткин, Д.А. Рудаков, А.Г. Солдатов, А.Л. Пушкарчук, В.А. Пушкарчук // Первая международная конференция «Междисциплинарные исследования и технологии будущего» (IDRFT'2011): Сборник тезисов, Минск, Беларусь (16-18 мая 2011). – Минск, Беларусь, 2011. – С. 41-42.

21. **Дикусар, Е.А.** Металлосодержащие производные фуллеренов, нанотрубок, карборанов, графена и графеноподобных нанокластеров / Е.А. Дикусар, В.М. Зеленковский, В.И. Поткин, Д.А. Рудаков // 7-ая Международная научно-практическая конференция «Найновите постижения на европейската наука»: Материалы конференции. – Т. 35: Химия и химическая технологии, София, Болгария (17-25 июня 2011). – София: «Бял ГРАД-БГ» ООД, 2011. – С. 7-9.

22. **Дикусар, Е.А.** Квантово-химическое моделирование цвиттер-ионов эндоэдрических производных бакминстерфуллеренов $1,2-(NH_3)@C_{180}(HR)$, $1,2-(NH_3)@C_{240}(HR)$ и $1,2-(NH_3)@C_{540}(HR)$ / Е.А. Дикусар, В.М. Зеленковский, В.И. Поткин // Modern problem of physical chemistry: V International Conference: Conference proceedings, Donetsk, Ukraine (5-8 September 2011). – Donetsk, Ukraine, 2011. – P. 239-240.

23. **Дикусар, Е.А.** Квантово-химическое моделирование строения производных карборанов и эндоэдрических бакминстерфуллеренов / Е.А. Дикусар, В.М. Зеленковский, В.И. Поткин, Д.А. Рудаков, А.Л. Пушкарчук // VIII Международная научно-практическая конференция «Нанотехнологии – производству – 2012»: Тезисы докладов, Фрязино (4-6 апреля 2012). – Фрязино, 2012. – С. 49-50.

24. **Дикусар, Е.А.** Фуллереновые медицинские нанороботы: тенденции и перспективы / Е.А. Дикусар, В.И. Поткин, В.М. Зеленковский, А.Л. Пушкарчук, А.Г. Солдатов, А.В. Щуровская // Биотехнология. Взгляд в будущее. Международная Интернет – конференции: Сборник трудов, Казань (17-19 апреля 2012). – Казань: Казанского (Приволжского) федерального ун-та, 2012. – С. 72-73.

25. **Дикусар, Е.А.** Эндоэдрические радон-222 содержащие производные бакминстерфуллеренов C_{60} и C_{80} в качестве нанороботов-истребителей опухолевых новообразований / Е.А. Дикусар, В.М. Зеленковский, А.Л. Пушкарчук, Д.А. Рудаков, С.Я. Килин, А.Г. Солдатов, А.В. Холопцев, Г.Ф. Батраков // Materiały VIII Międzynarodowej Naukowi-Praktycznej Konferencji «Wschodnie partnerstwo – 2012»: Materiały Konferencji. – Vol. 9: Medycyna. Nauk biologicznych. Chemia i chemiczne

technologie, Przemysł, Polsce (07-15 września 2012). – Przemysł, Polsce: Nauka i studia, 2012. – С. 58-62.

26. **Дикусар, Е.А.** Квантово-химическое проектирование радионуклидных карборановых и бакминстерфуллереновых нанокластерных агентов для диагностики и терапии онкологических заболеваний / Е.А. Дикусар, А.Л. Пушкарчук, В.М. Зеленковский, В.И. Поткин, Д.А. Рудаков, А.Г. Солдатов // XI Международная научно-практическая конференция «Нанотехнологии – производству»: Тезисы докладов, Фрязино (10-12 апреля 2013). – Фрязино, 2013. – С. 11-12.

27. **Дикусар, Е.А.** Использование структурных фрагментов природных соединений для целенаправленного создания биологически активных препаратов / Е.А. Дикусар, В.И. Поткин, Н.Г. Козлов, В.М. Зеленковский, А.Л. Пушкарчук, Д.А. Рудаков, А.Г. Солдатов // IX Всероссийская конференция «Химия и медицина» с молодежной научной школой по органической химии: Тезисы докладов, Уфа-Абзаково (4-8 июня 2013). – Уфа-Абзаково: ИОХ УНЦ РАН, 2013. – С. 170.

28. **Dikusar, E.A.** Fullerene nano-cluster as agents for diagnostics and therapy of oncological diseases / E.A. Dikusar, A.L. Pushkarchuk, V.M. Zelenkovski, V.I. Potkin, D.A. Rudakov, S.A. Kuten, A.G. Soldatov // 5th International Symposium «Methods and Applications of Computational Chemistry»: Book of Abstracts, Kharkiv, Ukraine (1-5 July 2013). – Kharkiv, 2013. – P. 99.

29. **Меерсон, Г.А.** Металлургия редких металлов / Г.А. Меерсон, А.Н. Зеликман – М.: Metallurgia, 1955. – 400 с.

30. **Блешинский, С.В.** Химия индия / С.В. Блешинский, В.Ф.Абрамова – Фрунзе: Изд-во АН Киргизской ССР, 1958. – 371 с.

31. Рассеянные металлы (индий, галлий, талий, рений). Области освоенного и возможного применения / под ред. К.А. Большакова. – М.: Metallurgia, 1959. – 450 с.

32. Химия элементов: в 2 т. / под ред. Н. Гринвуд, А. Эрншо. – М.: БИНОМ. Лаборатория знаний, 2008. – Т. 1. – 607 с.

33. **Реми, Г.** Курс неорганической химии / Г. Реми. – М.: Мир, 1972. – Т. 1. – 824 с.

34. **Некрасов, Б.В.** Основы общей химии / Б.В. Некрасов. – М.: Химия, 1973. – Т. 2. – 688 с.

35. **Гордон, А.** Спутник химика. Физико-химические свойства, методики, библиография / А. Гордон, Р. Форд. – М.: Мир, 1976. – 844 с.

36. **Lederer, C.M.** Table of the Isotopes / C.M. Lederer, J.M. Hollander, I. Perlman: 6th ed. – New-York: Wiley, 1968. – 600 p.

37. **Handbook of Chemistry and Physics**, 50th ed. – New-York: Wiley, 1968. – 480 p.

38. **Селинов, И.П.** Изотопы / И.П. Селинов – М.: Наука, 1970. – 624 с.

39. **Lawson, J.L.** The Radioactive Isotopes of Indium / J.L. Lawson, J.M. Cork // Physical Review. – 1937. – V. 52. – № 9. – P. 531-535.

40. **Zhdanok, S.A.** The Properties of Metal-Fullerene Materials / S.A. Zhdanok, E.M. Shpilevsky, M.E. Shpilevsky, L.V. Baran // XI International Conference «Hydrogen Materials Science and Chemistry of Carbon Nanomaterials (ICHMS'2009)»: Conference Book, Yalta, Crimea, Ukraine (25-31 August 2009). – Kiev: AHEU, 2009. – P. 432-435.

41. **Brown, P.R.** High Performance Liquid Chromatography / P.R. Brown, R.A. Hartwick. – New-York: Wiley, 1989. – V. 98. – 688 p.

42. **Djordjevic, A.** Catalytic Preparation and Characterization of C₆₀Br₂₄ / A. Djordjevic, M. Vojinovic-Miloradov, N. Petranovic, A. Devecerski, D. Lazar, B. Ribar // Fullerene Science and Technol. – 1998. – V. 6. – № 4. – P. 689-654.

43. **Dai, J.** Efficient Preparation of $La@C_{60}$, $C_{60}Br_{24}$ and the Electrical Conductivity of Sulfer-Doped Films / J. Dai, G. Xu, Y. Ding, Q. Wang // *Microelectronic Engineering*. – 2003. – V. 66. – № 1-4. – P. 186-191.
44. **Tebbe, F.N.** Synthesis and Singl-Crystal X-ray Structure of a Highly Symmetrical C_{60} Derivative, $C_{60}Br_{24}$ / F.N. Tebbe, R.L. Harlow, D.B. Chase, D.L. Thorn, G.C.J. Campbell, J.C. Calabrese, N. Herron, R.J.J. Young, E. Wasserman // *Science*. – 1992. – № 256 (5058). – P. 822-825.
45. **Gomes, S.** Synthesis of Fulleroles from a C_{60} Bromofullerene / S. Gomes, A. Daurte // *Revista Colombiana de Química*. – 2009. – V. 38. – № 1. – P. 83-95.
46. **Mrdanovic, J.Z.** Effects of Fullerenol Nano Particles $C_{60}(OH)_{24}$ on Micronuclei and Chromosomal Aberrations' Frequency in Peripheral Blood Lymphocytes / J.Z. Mrdanovic, S.V. Solajic, V.V. Bogdanovic, A.N. Djordjevic, G.M. Bogdanovic, R.D. Injac, Z.L. Rakocovic // *Digest Journal of Nanomaterials and Biostructures*. – 2012. – V. 7. – № 2. – P. 673-686.
47. **Дикусар, Е.А.** Синтез эфиров 4,5-дихлоризотиазол-3-карбоновой кислоты и некоторых терпеновых спиртов, стероидов и растительных фенолов / Е.А. Дикусар, Н.И. Нечай, В.И. Поткин, Р.В. Кабердин, Н.Г. Козлов, Н.В. Ковганко // *Химия природных соединений*. – 2003. – № 2. – С. 140-143.
48. **Поткин, В.И.** Синтез функционально замещенных гидроксипроизводных изоксазолов и изотиазолов / В.И. Поткин, С.К. Петкевич, А.В. Клецков, Е.А. Дикусар, Ю.С. Зубенко, Н.А. Жуковская, В.В. Казбанов, С.Г. Пашкевич // *Журнал органической химии*. – 2013. – Т. 49. – Вып. 10. – С. 1543-1553.
49. **Кишкентаева, А.С.** Сложные эфиры природного лактона гроссгемина / А.С. Кишкентаева, С.А. Ивасенко, Г.А. Атажанова, С.М. Адекенов, Е.А. Дикусар, С.К. Петкевич, А.В. Клецков, Н.Г. Козлов, В.И. Поткин // *Актуальні питання біології, медицини та фармакології: Матеріали науково-практичної конференції з міжнародною участю, Дніпропетровськ. – Харків (26-27 вересня 2013)*. – Дніпропетровськ – Харків: «Екограф», 2013. – С. 148-149.
50. **Дикусар, Е.А.** Сложные эфиры гроссгемина с фармакофорными гетероциклическими карбоновыми кислотами / Е.А. Дикусар, С.К. Петкевич, А.В. Клецков, Н.Г. Козлов, В.И. Поткин, А.С. Кишкентаева, С.А. Ивасенко, Г.А. Атажанова, С.М. Адекенов // *Химия и технология растительных веществ: Тезисы докладов VIII Всероссийской научной конференции, Калининград (7-10 октября 2013)*. – Сыктывкар-Калининград, 2013. – С. 73.
51. **Kumar, C.S.S.** *Nanomaterials for Cancer Therapy* / C.S.S. Kumar. – Weinheim: Wiley-VCH, 2006. – 145 p.
52. **Craig, A.S.** Crystal and molecular structure of a seven-coordinate chloroindium(III) complex of 1,4,7-triazacyclononanetriacetic acid / A.S. Craig, I.M. Helps, D. Parker, H. Adams, N.A. Bailey, M.G. Williams, J.M.A. Smith, G. Ferguson // *Polyhedron*. – 1989. – V. 8. – № 20. – P. 2481-2484.
53. **Riesen, A.** Synthesis and X-ray structural characterisation of seven coordinate macrocyclic In^{3+} complexes with relevance to radiopharmaceutical applications / A. Riesen, T.A. Kaden, W. Ritter, H.R. Mäcke // *Journal of the Chemical Society, Chemical Communications*. – 1989. – № 8. – P. 460-462.
54. **Shmidt, M.W.** General Atomic and Molecular Electronic Structure System / M.W. Shmidt, K.K. Baldrige, J.A. Boatz, S.T. Elbert, M.S. Gordon, J.H. Jensen, S. Koseki,

- N. Matsunaga, K.A. Nguyen, S.J. Su, T.L. Midus, M. Dupnis, J.A. Montgomery // Journal of Computational Chemistry. – 1993. – V. 14. – № 7. – P. 1347-1363.
55. **Чаркин, О.П.** Теоретическое и экспериментальное исследование молекул и ионов фуллеренола $C_{60}(OH)_{24-n}(OL)_n$ и $C_{60}(OH)_{24-n}(OL)_n L^+$, последовательно замещенных атомами щелочных металлов L ($n=1-24$) / О.П. Чаркин, Н.М. Клименко, И.Ш. Ванг, Ч.Ч. Ванг, Ч.Х. Чен, Ш.Х. Лин // Журнал неорганической химии. – 2011. – Т. 56. – Вып. 4. – С. 623-633.
56. **Wang, B.C.** Theoretical studies of $C_{70}(OH)_n$ ($n=14, 16, 18$ and 20) fullerenoles / B.C. Wang, H.W. Wang, H.C. Tso, T.L. Chen, Y.M. Chou // Journal of Molecular Structure: THEOCHEM. – 2002. – V. 581. – № 1-3. – P. 177-186.
57. **Семенов, К.Н.** Фуллеренол–70– d : синтез, идентификация, политермическая растворимость и плотность водных растворов / К.Н. Семенов, Н.А. Чарыков, А.Е. Пронских, В.А. Кескинов // Наносистемы: Физика, Химия, Математика. – 2012. – Т. 3. – № 6. – С. 146-156.
58. **Zhao, B.** Pristine (C_{60}) and Hydroxylated ($C_{60}(OH)_{24}$) Fullerene Phototoxicity towards HaCaT Keratinocytes / B. Zhao, Y.Y. He, P.J. Bilski, C.F. Chignell // Chemical Research in Toxicology. – 2008. – V. 21. – № 5. – P. 1056-1063.
59. **Сидоров, Л.Н.** Эндоедральные фуллерены / Л.Н. Сидоров, И.Н. Иоффе // Соросовский образовательный журнал. – 2001. – Т. 7. – № 8. – С. 30-36.
60. **Nagase, S.** Endohedral Metallofullerenes: New Spherical Cage Molecules with Interesting Properties / S. Nagase, K. Kobayashi, T. Akasaka // Bulletin of the Chemical Society of Japan. – 1996. – V. 69. – № 8. – С. 2131-2142.
61. **Haddon, R.C.** Electronic structure, conductivity and superconductivity of alkali metal doped C_{60} / R.C. Haddon // Pure and Applied Chemistry. – 1993. – V. 65. – № 1. – P. 11-15.