

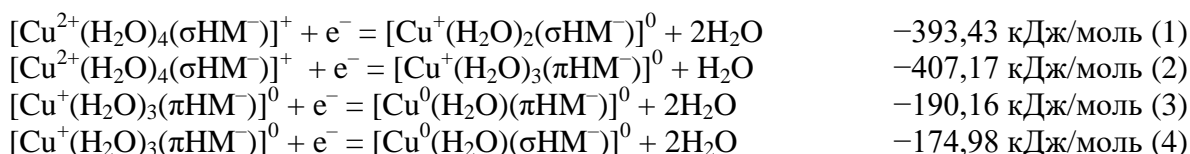
## КВАНТОВО-ХІМІЧНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ПРОЦЕСУ ЕЛЕКТРОВІДНОВЛЕННЯ АЦИДОАКВАКОМПЛЕКСІВ КУПРУМУ З МАЛЕЇНОВОЮ КИСЛОТОЮ

*Осокін Є.С., Полонський В.А., Варгалюк В.Ф.*

Дніпровський національний університет ім. Олесья Гончара, [osokin@cf.dnu.dp.ua](mailto:osokin@cf.dnu.dp.ua)

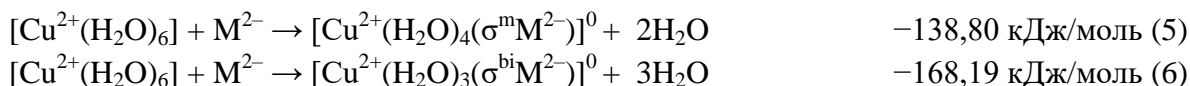
В попередніх роботах [1–4], за допомогою квантово-хімічних методів була досліджена електронна та геометрична будова малеїнатних ацидоаквакомплексів Купруму.

У роботі порівнювались вірогідні електрохімічні та хімічні реакції з утворенням змішаних ацидоаквакомплексів Купруму з малеїнковою кислотою в різних депротонованих формах ( $\text{HM}^-$ ,  $\text{M}^{2-}$ ) та різною координацією ліганду. Було показано, що приєднання першого електрона до малеїнатних ацидоаквакомплексів  $\text{Cu}^{2+}$  протікає зі значним енергетичним ефектом:

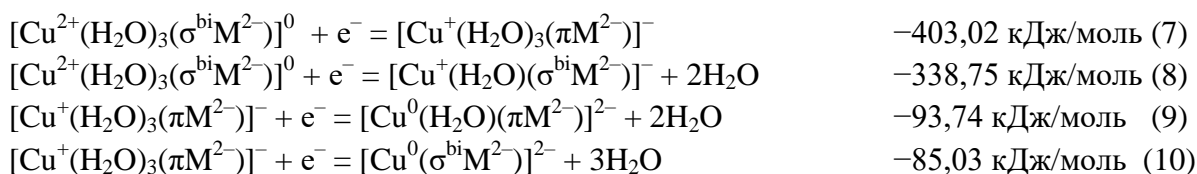


За реакціями видно, що утворення  $\pi$ -комплексу  $[\text{Cu}^+(\text{H}_2\text{O})_3(\pi\text{HM}^-)]^0$  в процесі відновлення (2) протікає на 14 кДж/моль краще ніж утворення відповідного  $\sigma$ -комплексу. Подальше відновлення призводить до утворення комплексу  $[\text{Cu}^0(\text{H}_2\text{O})(\pi\text{HM}^-)]^0$  (3). Такий процес протікає на 15 кДж/моль більш енергетично вигідніше ніж утворення  $[\text{Cu}^0(\text{H}_2\text{O})(\sigma\text{HM}^-)]^0$ .

Також показані вірогідні реакції відновлення комплексів іонів Купруму з іоном  $\text{M}^{2-}$ . Було показано, що у водному розчині більш енергетично вигідніше на 29,39 кДж/моль утворюються комплекси  $[\text{Cu}^{2+}(\text{H}_2\text{O})_3(\sigma^{\text{bi}}\text{M}^{2-})]^0$  (6) ніж  $[\text{Cu}^{2+}(\text{H}_2\text{O})_4(\sigma^{\text{m}}\text{M}^{2-})]^0$  (5).

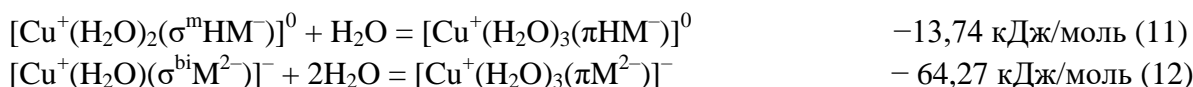


Як видно за реакціями, що приєднання електрону до комплексу  $[\text{Cu}^{2+}(\text{H}_2\text{O})_3(\sigma^{\text{bi}}\text{M}^{2-})]^0$  більш енергетично вигідніше протікає з утворенням  $\pi$ -комплексу  $[\text{Cu}^+(\text{H}_2\text{O})_3(\pi\text{M}^{2-})]^-$  (7).

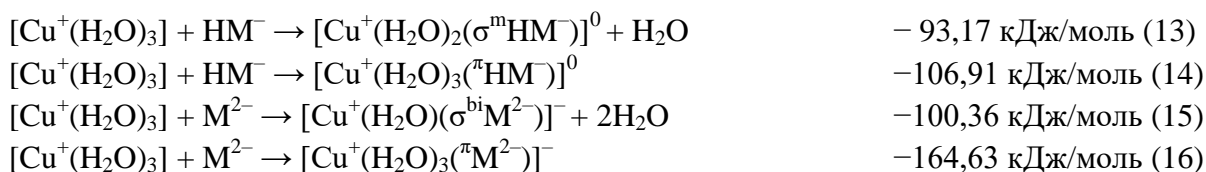


Приєднання другого електрону до комплексу  $[\text{Cu}^+(\text{H}_2\text{O})_3(\pi\text{M}^{2-})]^-$  більш енергетично вигідніше протікає з утворенням комплексу  $[\text{Cu}^0(\text{H}_2\text{O})(\pi\text{M}^{2-})]^{2-}$  (9) на 9 кДж/моль.

Також показано, що комплекси можуть утворюватись шляхом перетворення  $\sigma$ -комплексів  $\text{Cu}^+$  з  $\text{HM}^-$  або  $\text{M}^{2-}$  в процесі приєднання молекул води:



Паралельно можливе протікання процесу приєднання різних депротонованих форм малеїнкової кислоти до аквакомплексів  $\text{Cu}^+$ .



Видно, що більш енергетично вигідно протікають реакції з утворенням  $\pi$ -комплексів  $[\text{Cu}^+(\text{H}_2\text{O})_3(\pi\text{HM}^-)]^0$  та  $[\text{Cu}^+(\text{H}_2\text{O})_3(\pi\text{M}^{2-})]^-$  за реакціями (14) та (16), відповідно.

1. Features of (d $\pi$ -p $\pi$ )-binding of Cu(I) ions with acrylic, maleic and fumaric acids in aqueous solution / V.F. Vargalyuk, Y. S. Osokin, V. A. Polonskyu, V. N. Glushkov // Journal of Chemistry and Technologies. – 2019. – Vol. 27. – P. 148–157.

2. Vargalyuk V. F. Formation of the  $\pi$ -complexes of copper atoms with acrylic, maleic and fumaric acids in aqueous medium / V. F. Vargalyuk, Y. S. Osokin, V. A. Polonskyu // Journal of Chemistry and Technologies. – 2020. – Vol. 28, No. 2. – P. 153–160.

3. Осокін Є. С. Особливості d $\pi$ -p $\pi$ -зв'язування деяких похідних акрилової та малеїнової кислоти з атомами Купруму в низьких ступенях окиснення / Є. С. Осокін, В. Ф. Варгалюк, В. А. Полонський // «Хімічні проблеми сьогодення» тез. доп. II Міжнародної наукової конференції студентів, аспірантів і молодих учених. – Вінниця, 2019. – С. 30.

4. Osokin Y.S. Cechy wiązania  $\pi$ -kompleksów atomów miedzi z niektórymi nienasyconymi kwasami / Y.S. Osokin, V. F. Vargalyuk // Міжнародна науково-практична конференція молодих науковців, аспірантів і здобувачів вищої освіти «Проблеми та перспективи розвитку сучасної науки». – 2021. – С. 485–487.

## ЩОДО МОЖЛИВОСТЕЙ ЗАСТОСУВАННЯ КОМПОЗИТІВ НА ОСНОВІ Fe<sub>3</sub>O<sub>4</sub>

*Перехрисюк М.М., Кусяк Н.В., Кичкирук О.Ю., Матвієнко О.В.*

Житомирський державний університет імені Івана Франка, [nkusyak@ukr.net](mailto:nkusyak@ukr.net)

Підвищення біосумісності нанокompatитів на основі Fe<sub>3</sub>O<sub>4</sub> та інших матриць шляхом функціоналізації поверхні забезпечує активність цільової системи, вибірковість зв'язування наночастинок з певними хімічними речовинами або клітинами. Тому важливо розуміти процес і механізм взаємодії біологічних речовин з поверхнями різної природи, вплив на конформацію та функціональну здатність білкових речовин. Ця взаємодія буде визначатися хімічною природою активних центрів поверхні: фізико-хімічними (заряд поверхні, реакційноздатні групи, рН<sub>ІІР</sub>) і геометричними (розмір, структура поверхні) властивостями наночастинок. Матеріали як субстрати для адресної доставки терапевтичних або діагностичних агентів широко використовуються в сучасній медицині. Однак актуальним залишається вивчення їх взаємодії як з транспортованими препаратами, так і з компонентами біологічного середовища. Відповідність принципам біосумісності, адсорбційної активності, часу перебування в біологічному середовищі та цільовій зоні, гідрофільності/гідрофобності тощо – основні вимоги до фізико-хімічних показників цих матеріалів.

Оскільки однією з форм зовнішньої стимуляції фізичного націлювання доставки ліків до клітин є магнітне поле, для дослідження були синтезовані нанокompatити на основі Fe<sub>3</sub>O<sub>4</sub> з функціональними групами - NH<sub>2</sub>, - SH, - COOH. Імуноглобулін (Ig), який має широкий спектр опсонізуючих і нейтралізуючих властивостей проти бактерій, вірусів та інших патогенів, обраний як модельний білок. Основною метою даної роботи було вивчення процесів адсорбційної іммобілізації Ig на синтезованих композитах. Крім того, вивчається адсорбційна іммобілізація альбуміну.