

**Кунпан П.И., Авалиани Б.С.**

## **АДСОРБЦИОННЫЕ СВОЙСТВА НАНОКАПСУЛ НА ОСНОВЕ ФУЛЛЕРЕНОВ**

**Научные руководители: канд. хим. наук, доц. Дюдюн О.А., ассист. Комарова А.А.**

*Кафедра общей и биологической химии*

*Ставропольский государственный медицинский университет, г. Ставрополь*

**Актуальность.** Современные подходы к разработке лекарственных форм всё чаще включают в себя использование нанотехнологий, в том числе углеродных наноматериалов, обладающих высокой биосовместимостью и способностью к функционализации. Фуллерены, представляющие собой замкнутые молекулы из атомов углерода, обладают рядом уникальных характеристик – от выраженной липофильности до способности образовывать комплексы с ионами металлов и органическими молекулами. Их потенциал в качестве носителей для доставки биоактивных соединений в живых организмах обусловлен не только строением, но и высокой устойчивостью к внешним воздействиям, что делает их объектом пристального внимания в фармацевтической науке.

**Цель:** моделирование механизмов адсорбции биоактивных молекул на поверхности фуллереновых капсул, интегрированных в полимерную водорастворимую матрицу, с использованием современных методов квантово-химического анализа.

**Материалы и методы.** В качестве исследуемой модели была выбрана структура фуллерена C<sub>60</sub>, встроенная в водорастворимую среду на основе модифицированного поливинилового спирта. Для построения пространственных структур и их анализа применялась программа ArgusLab 4.0.1, с использованием метода Хартри-Фока – одного из наиболее достоверных методов расчёта электронных свойств молекул. Расчёты включали определение полной энергии молекулярных комплексов, а также анализ взаимодействий с фрагментами этерифицированной олеиновой кислоты, что позволило проследить энергетические и структурные изменения при формировании адсорбционных систем.

**Результаты и их обсуждение.** Компьютерное моделирование подтвердило способность фуллеренов к образованию устойчивых комплексов с полярными и липофильными молекулами за счёт наличия активных  $\pi$ -связей и сфероидальной полости. Показано, что присоединение фрагментов олеиновой кислоты сопровождается увеличением теплоты образования комплекса, что свидетельствует о стабильности образуемых соединений. Кроме того, зафиксированы изменения геометрии молекулы при последовательном присоединении дополнительных функциональных групп. Это указывает на возможность регулирования свойств капсулы в зависимости от состава и природы присоединённых молекул, что может быть критически важно для адаптации системы под конкретные фармакологические задачи.

**Выводы.** Проведённый анализ подтвердил перспективность фуллеренов как универсальной платформы для создания систем транспорта лекарственных средств. Возможность направленного модифицирования их поверхности и высокая стабильность полученных комплексов позволяют прогнозировать их успешное применение в фармации. Будущие исследования в данной области могут быть направлены на расширение спектра взаимодействующих молекул и оценку биологической активности полученных наноструктур в условиях *in vitro* и *in vivo*.