

**ФИЗИЧЕСКАЯ АДсорбция МЕЖДу МОЛЕКУЛОЙ Куркумина
И УГЛЕРОДНОЙ НАНОТРУБКОЙ (8,0-6)**
**PHYSICAL ADSORPTION BETWEEN MOLECULAR OF COURCUMINE
AND CARBON NANOTUBE**

И. И. Балаханова, С. Н. Шахаб
I. Balakhanava, S. Shahab

*Белорусский государственный университет, МГЭИ им. А. Д. Сахарова БГУ,
г. Минск, Республика Беларусь
irinabalahanova@gmail.com
Belarusian State University, ISEI BSU, Minsk, Republic of Belarus*

В работе впервые исследовались адсорбционные свойства комплекса между молекулой Куркумина ((1E,6E)-1,7-бис(4-гидрокси-3-метоксифенил)-1,6-гептадиен-3,5-дион) и углеродной нанотрубкой (УНТ) (8,0-6) методом теории функционала плотности (DFT) в водной среде.

In the present work the adsorption properties of the molecule Curcumin ((1E,6E)-1,7-bis(4-hydroxy-3-methoxyphenyl)-1,6-heptadiene-3,5-dione) on CNT(8,0-6) nanotube were studied by the Density Functional Theory (DFT) in an aqueous medium.

Ключевые слова: антиоксидантная активность, Куркумин, нанотрубка, электронный спектр.

Keywords: antioxidant activity, Curcumin, nanotube, electronic spectrum.

В течение последних 50 лет был создан определенный арсенал эффективных противоопухолевых препаратов, что позволило достигнуть значительных успехов в лечении злокачественных опухолей человека. Однако большинство новообразований являются/становятся резистентными к проводимой противоопухолевой химиотерапии, ограничивая эффективность лечения. Требуется разработка новых современных высокоэффективных противоопухолевых препаратов [1; 2].

В последнее время возрос интерес к другому часто используемому подходу – скринингу веществ природного происхождения, преимущество которого в том, что вещества-кандидаты уже обладают некоторыми свойствами, необходимыми для лекарств (например, абсорбцией в ЖКТ и метаболизмом), а также высоким химическим разнообразием, необходимым для изучения корреляций активность – структура. Выделенные из природных источников вещества могут быть использованы в скрининге высокой плотности, и лидерное соединение может быть оптимизировано с помощью методов комбинаторной химии или других подходов современной клинической химии [3; 4].

Одним из таких соединений является «куркума». Куркумин (турмерик) – основной куркуминоид, входящий в состав корня куркумы, являющейся растением семейства имбирных. К куркуминоидам также относятся диметоксикуркумин и бис-диметоксикуркумин. Именно благодаря куркуминоидам корень куркумы имеет характерный жёлтый цвет.

В данной работе обсуждены и рассчитаны электронные свойства, УФ-, ЯМР- спектры и заряды атомов полученного комплекса между молекулой куркумина и углеродной нанотрубкой (УНТ) (8,0-6). Электронный спектр комплекса между молекулой Куркумина и УНТ (8,0-6) в среде растворителя был рассчитан методом теории зависимости от времени (TD-DFT). Спектры поглощения Куркумина и УНТ (8,0-6) сравнивались со спектром поглощения полученного комплекса для установления влияния УНТ (8,0-6) на смещение спектра поглощения комплекса в видимую область спектра. Найден новый способ доставки Куркумина в больные клетки с помощью комплекса, образованного между молекулой куркумина и (УНТ) (8,0-6).

ЛИТЕРАТУРА

1. *Shahab, S.* Adsorption Properties of the Molecule Resveratrol on CNT(8,0-10) Nanotube: Geometry Optimization, Molecular Structure, Spectroscopic (NMR, UV/Vis, Excited State), FMO, MEP and HOMO-LUMO Investigations / M. Sheikhi, S. Shahab, M. Khaleghian, F. H. Hajikolaee, I. Balakhanava, R. Alnajjar // J. of Molecular Structure – 2018.
2. *Yarbro, J. W.* The scientific basis of cancer chemotherapy / J. W. Yarbro // The Chemotherapy. – 1992. – P. 2–14.
3. *Shahab, S.* Interaction between new synthesized derivative of (E,E)-azomethines and BN(6,6-7) nanotube for medical applications: Geometry optimization, molecular structure, spectroscopic (NMR, UV/Vis, excited state), FMO, MEP and HOMO-LUMO investigations / M. Sheikhi, S. Shahab, M. Khaleghian, F. H. Hajikolaee // J. of Molecular Structure. –2017. – Vol. 1146. – P. 881–888 .
4. *Shahab S.* Synthesis, geometry optimization, spectroscopic investigations (UV/Vis, excited states, FT-IR) and application of new azomethine dyes / M. Sheikhi, S. Shahab, M. Khaleghian, F. H. Hajikolaee // J. of Molecular Structure. – 2017. – Vol. 1148. – P. 134–149.