

СПЕКТРАЛЬНЕ ТА КВАНТОВО-ХІМІЧНЕ ДОСЛІДЖЕННЯ ВЗАЄМОДІЙ В СУПРАМОЛЕКУЛЯРНИХ СИСТЕМАХ: КУРКУМІН - ДЕКАМЕТОКСИН - КРЕМНЕЗЕМ У ВОДНИХ РОЗЧИНАХ

Козакова О.О., Ліпковська Н.О., Барвінченко В.М.

*Інститут хімії поверхні ім. О.О. Чуйка Національної академії наук України
вул. Генерала Наумова 17, 03164, Київ-164
E-mail: kazakova_olga@ukr.net*

*Спектрофотометричним методом виявлено особливості взаємодії в супрамолекулярній системі: природний гідрофобний поліфенол куркумін – антисептична катіонна ПАР декаметоксин – високодисперсний кремнезем. Знайдено, що суттєві зміни спектральних характеристик куркуміну в водних розчинах і на поверхні сорбента залежать від концентрації даної катіонної ПАР, яка може існувати в розчині у вигляді мономерів, асоціатів та міцел. Для визначення механізму адсорбції супрамолекулярного комплексу куркуміну (в кетонній чи енольній формі) з декаметоксином на поверхні кремнезему використано метод РМ7 та модель сольватації COSMO, реалізовані в програмному комплексі MORAC2016. Розподіл електростатичного та гідрофобного потенціалів досліджуваних молекул, розрахований методом FieldView 2.0.2 (програмний пакет *Flare*), свідчить про значний внесок гідрофобних взаємодій при утворенні супрамолекулярних комплексів куркуміну з декаметоксином у розчині та на поверхні кремнезему. Отримані результати мають практичне значення та можуть бути використані при розробці нових, більш ефективних лікарських засобів, що містять біоактивний куркумін, антисептик декаметоксин та кремнеземний ентеросорбент.*

Ключові слова: *високодисперсний кремнезем, куркумін, декаметоксин, спектрофотометрія, квантово-хімічне моделювання*

Вступ

Для розширення спектру медичного застосування відомого ентеросорбенту Силікс – пірогенного високодисперсного аморфного діоксиду кремнію (ВДК) [1] були проведені комплексні фізико-хімічні та медико-біологічні дослідження зі створення нового покоління лікарських препаратів та дієтичних добавок, до складу яких окрім кремнезему входили лікарські рослини різної терапевтичної спрямованості або фізіологічно активні сполуки рослинного походження [2 – 5]. У таких комбінованих лікарських композитах терапевтична активність біоактивних молекул і їх комплексів поєднувалася з детоксикуючою дією даного сорбенту.

Протягом останнього десятиліття при дослідженні природного поліфенолу куркуміну (CU) були виявлені його протизапальні, антиоксидантні, нейропротекторні, гепатопротекторні, антипроліферативні, гіпохолестеринемічні властивості, що передбачає ефективне використання цієї сполуки в комплексній терапії різних патологій [6, 7]. Однак клінічне застосування куркуміну лімітується його низькою розчинністю у водному середовищі. Перспективним шляхом підвищення розчинності і відповідно біодоступності є включення молекул в гідрофільні наноструктури, що відбувається як при солубілізації в міцелах поверхнево-активних речовин (ПАР), так і при адсорбції на високодисперсному кремнеземі. Раніше, фізико-хімічні дослідження показали підвищення розчинності і адсорбції на ВДК природних поліфенолів (флавоноїдів) завдяки утворенню супрамолекулярних комплексів з катіонними ПАР [8, 9]. До катіонних ПАР з високою антисептичною ефективністю належить декаметоксин (DM) – вітчизняний препарат [10, 11] з низькою токсичністю, екологічно безпечний і здатний до біорозкладання.

Метою даної роботи було спектральні та квантовохімічні дослідження супрамолекулярних взаємодій КПАР медичного призначення декаметоксину з природним поліфенолом куркуміном для встановлення закономірностей зміни спектральних, адсорбційних властивостей і таутомерних перетворень в розчинах і на поверхні високодисперсного кремнезему.

Матеріали, моделі і методи дослідження

У роботі використовували куркумін (Sigma-Aldrich) та декаметоксин (дослідне виробництво Інституту органічної хімії НАН України), вихідні розчини яких готували шляхом розчинення точних наважок в етиловому спирті та воді, відповідно. Як сорбент застосовували кремнезем А-300 (питома поверхня 300 м²/г) виробництва Калуського дослідно-експериментального заводу Інституту хімії поверхні ім. О.О.Чуйка НАН України у вигляді 0.5% водної дисперсії (іонна сила $I=0.01$ н) яку готували перемішуванням 2.50 г сорбенту і 0.29 г NaCl з 500 мл води магнітною мішалкою впродовж 20 хв.

Електронні спектри поглинання розчинів та дисперсій реєстрували на спектрофотометрі Specord M-40 (Carl Zeiss Jena, Німеччина) у комірці для каламутних розчинів. Для усунення впливу фону спектри обробляли методом гетерохроматичної екстраполяції при двох довжинах хвиль [12].

Адсорбцію куркуміну на поверхні ВДК вивчали в статичних умовах, як було описано в роботі [13].

Для визначення механізму адсорбції всіх компонентів супрамолекулярної системи куркумін (в кетонній чи енольній формах (рис. 1) – декаметоксин (рис. 2) на поверхні кремнезему використано метод PM7 та модель сольватації COSMO, реалізовані в програмному комплексі MORAC2016 [14]. Напівемпіричний метод PM7, найбільш поширений для розрахунків великих систем, був розроблений для покращення опису нековалентних взаємодій (дисперсійних, водневих та галогенних зв'язків). Сольватаційна модель COSMO (COnductor-like Screening MOdel) [15] була застосована як найбільш використовувана в обчислювальній хімії для моделювання ефектів сольватації у великих системах. На відміну від поляризованої моделі континууму (PCM) з точними діелектричними граничними умовами, метод COSMO використовує апроксимативну функцію масштабування $f(\epsilon)$. Порівняння методів COSMO та формалізму інтегрального рівняння PCM (IEFPCM) [16], що поєднує точні діелектричні граничні умови зі зменшеною похибкою зовнішнього заряду, показало, що відмінності між цими методами стосовно відхилень від експериментальних даних сольватації є незначними. Аналіз

зарядів на атомах карбонільної групи куркуміну виконано методом Хартрі – Фока, базис 6-31G(d).

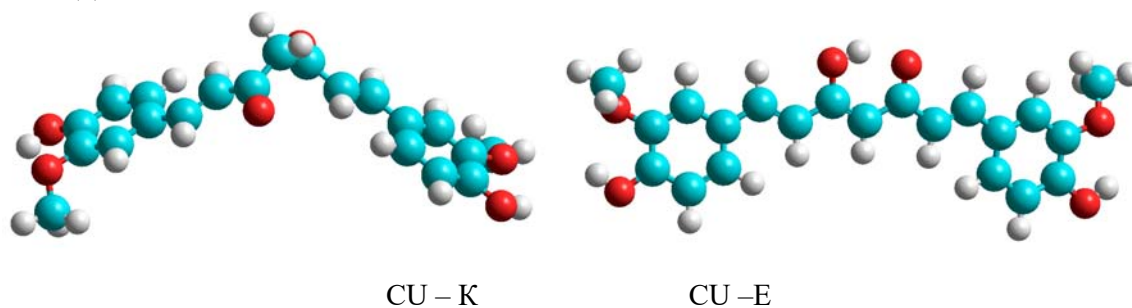


Рис. 1. Кетонний та енольний таутомери куркуміну: оптимізована геометрія

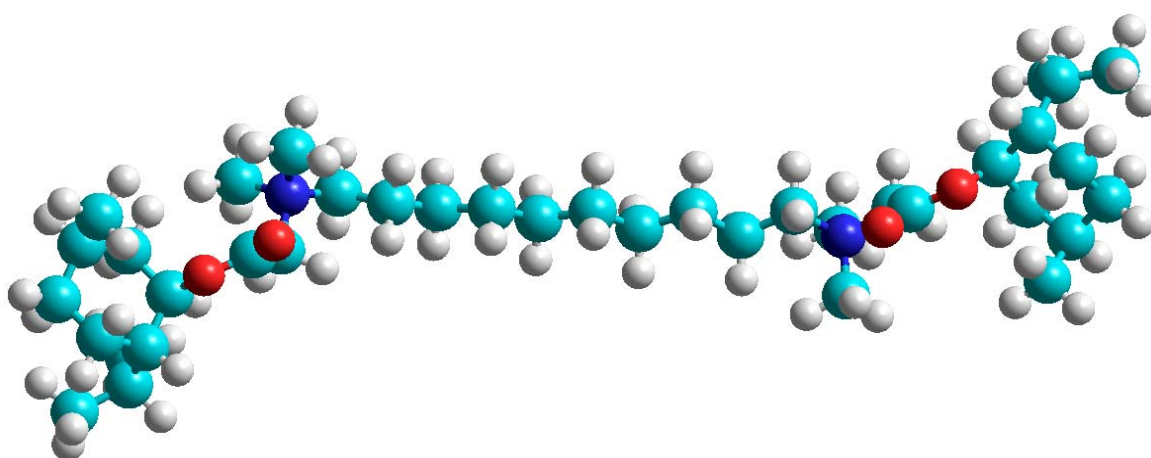


Рис. 2. Молекула декаметоксину: оптимізована геометрія

ВДК моделювали в кластерному наближенні; як структурний фрагмент великих кластерів (рис. 3) було обрано гексагональний кластер з 12 тетрадрів $\text{SiO}_{4/2}$, який найкраще відображає структурні та енергетичні характеристики поверхні.

Розподіл електростатичного та гідрофобного потенціалів молекул розраховували за допомогою методу FieldView 2.0.2, реалізованому у програмному пакеті Flare™ [17-19].

Результати та їхнє обговорення

На підставі розрахунків вільних енергій Гіббса різних таутомерів куркуміну (рис. 1) з урахуванням сольватації було встановлено, що у водному розчині термодинамічно вигідніше існування куркуміну в кето-формі, тоді як взаємодія з кластером $\text{SiO}_{4/2}$ приводить до стабілізації енольного таутомера [13]. Для можливості визначення співвідношення кетонної та енольної форм куркуміну були отримані спектри поглинання CU в розчинах DM різної концентрації і нормовані відносно ізобестичної точки при 387 нм. Отримані величини $R=A/A_{387}$ використовували як аналітичний сигнал (рис. 4). Залежність інтенсивності смуг даних нормованих спектрів, які відповідають кетонній (346 нм) та енольній (430 нм) формам куркуміну, від концентрації DM наведено на рис. 5.

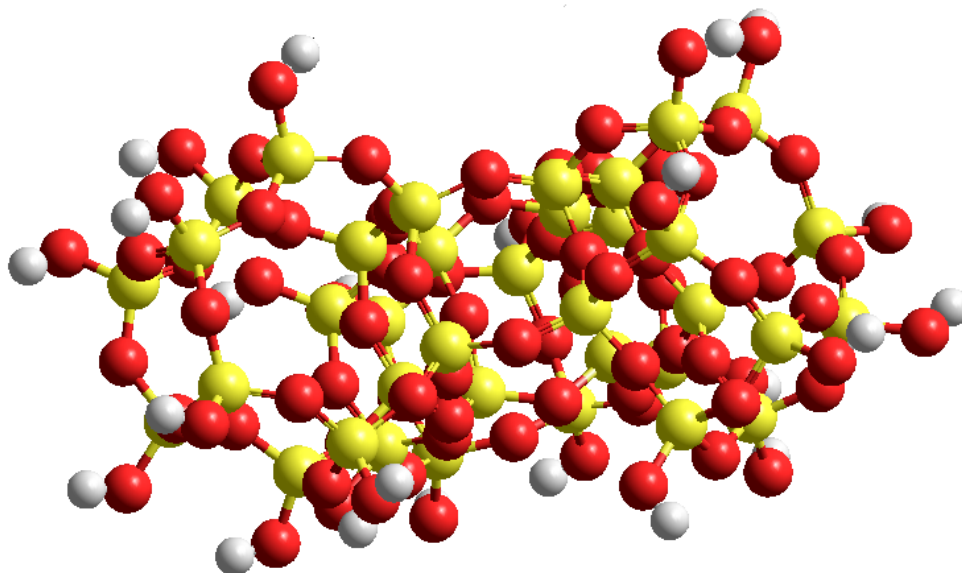


Рис. 3. Кластер кремнезему з 36 тетрадрів $\text{SiO}_{4/2}$ з оптимізованою геометрією

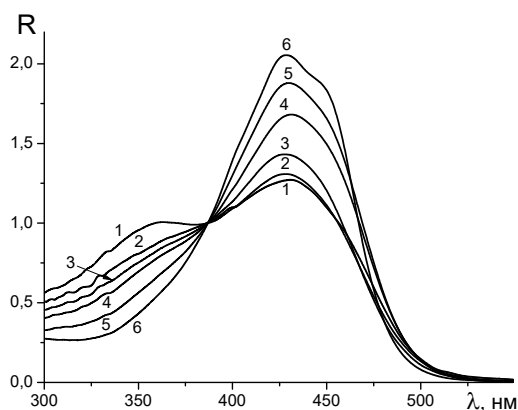


Рис. 4. Нормовані спектри поглинання куркуміну в розчинах декаметоксину різної концентрації.
 $C_{\text{Cu}} = 4 \cdot 10^{-5} \text{ M}$, C_{DM} , 10^{-3} M : 0 (1), 2 (2), 3 (3), 4 (4), 6 (5), 18 (6)

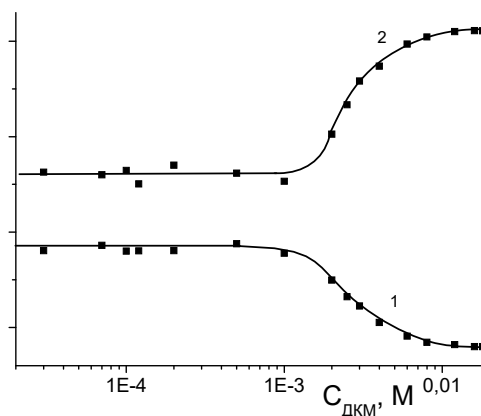


Рис. 5. Залежність інтенсивності смуг кетонної (1) та енольної (2) форм куркуміну від концентрації декаметоксину.
 $\lambda_{\text{max}} = 346$ (1) та 430 (2) нм

При концентрації $C_{\text{DM}} < 1 \cdot 10^{-3} \text{ M}$ співвідношення таутомерів не змінюється, і вміст кето-форми залишається на рівні водного розчину. Збільшення $C_{\text{DM}} > 1 \cdot 10^{-3} \text{ M}$ приводить до зростання смуги енольної форми і одночасного зменшення смуги кетонної форми, яка повністю зникає в мицелярному розчині декаметоксину при $C_{\text{DM}} > \text{ККМ}$ ($\text{ККМ}_{\text{DM}} = (1,0 \pm 0,2) \cdot 10^{-2} \text{ M}$ [20]). При цьому оптична густина розчину обумовлюється поглинанням лише енольної форми при 346 нм (рис.4).

Куркумін і декаметоксин мають в складі своїх молекул як полярні, так і неполярні групи, тому можуть утворювати супрамолекулярні комплекси за рахунок

електростатичних і гідрофобних взаємодій, а також водневого зв'язку. Оскільки декаметоксин як поверхнево-активна речовина в залежності від концентрації може існувати в розчині у вигляді мономерів, асоціатів та міцел, його взаємодія з CU здатна відбуватися за різними механізмами і, відповідно, утворені супрамолекулярні комплекси у розчині і на поверхні ВДК будуть характеризуватися різними спектральними властивостями. Аналіз зарядів на атомах карбонільної групи куркуміну показав, що при взаємодії молекул CU і DM позитивно заряджений атом азоту декаметоксину посилює поляризацію карбонільної групи куркуміну, про що свідчить зміна зарядів: $\Delta q_c=0.02$ а.о і $\Delta q_o=0.85$ а.о. Експериментальним підтвердженням теоретичних розрахунків є зростання батохромного зсуву λ_{\max} смуги поглинання куркуміну з 427 нм до 438 нм в розчинах з низькою концентрацією DM ($<0,002M$) (рис.6,а), а також гіпсохромний зсув цієї смуги з початком агрегування молекул КПАР в передміцелярній області до мінімальних значень λ_{\max} при $C_{DM}>KCM$.

Зміна λ_{\max} спектрів сорбованого куркуміну (рис.6,б) може бути обумовлена зміною в результаті адсорбції на ВДК просторової орієнтації молекул CU у складі комплексів з DM, адже при збільшенні концентрації КПАР горизонтальна орієнтація комплексів переходить у вертикальну, що може спричинити порушення кон'югації спряженого π -зв'язку в молекулі куркуміну.

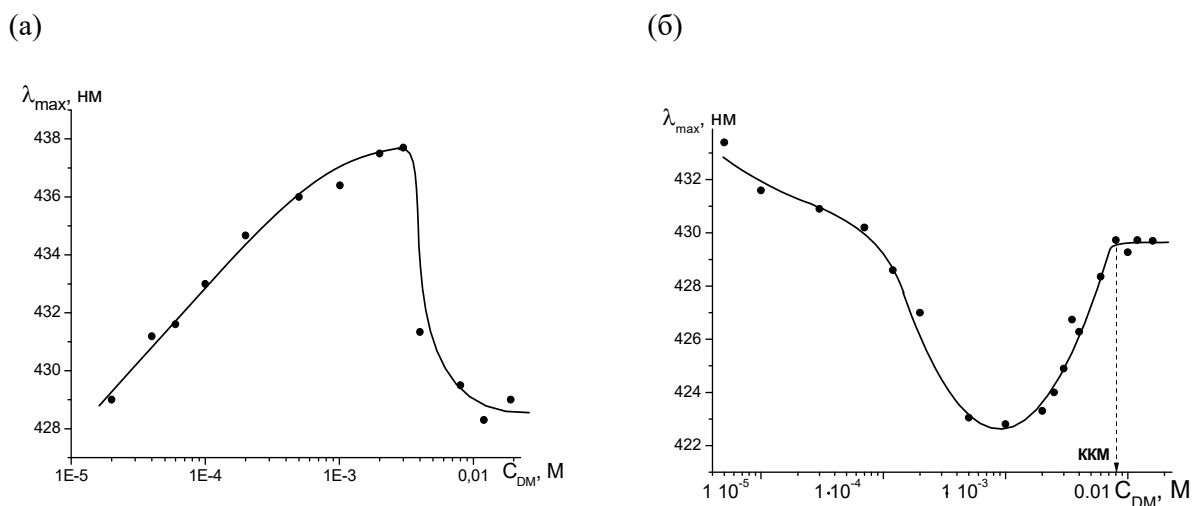


Рис. 6. Залежність λ_{\max} спектрів куркуміна в присутності декаметоксину в розчинах (а) і на поверхні ВДК (б) від концентрації DM. $C_{CU} = 4 \cdot 10^{-5} M$

Методом Китаури-Морокуми [21] проаналізовано природу взаємодії куркуміну з кремнеземом і виявлено, що електростатична взаємодія дає основний внесок (75 %) в утворення водневих зв'язків молекул куркуміну з поверхнею кремнезему. Для відображення електростатичних та гідрофобних взаємодій у системі CU – DM – SiO₂ розраховано розподіл електростатичного та гідрофобного потенціалів усіх компонентів даної супрамолекулярної системи за допомогою методу FieldView 2.0.2 (рис. 7).

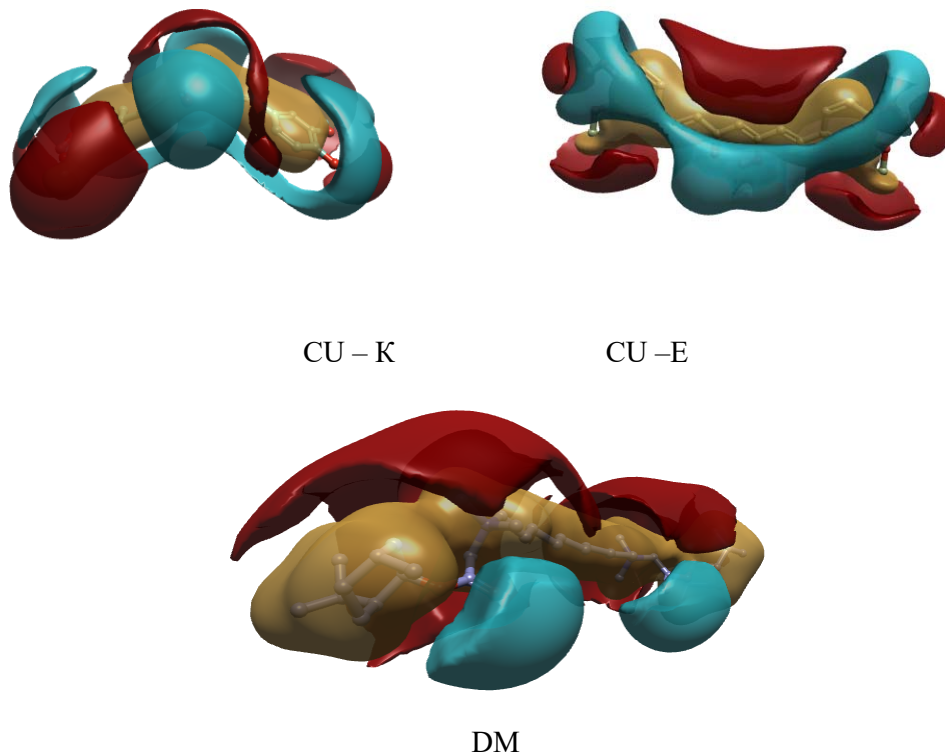


Рис. 7. Розподіл позитивного (червоний) та негативного (блакитний колір зовнішньої оболонки) електростатичного та гідрофобного (коричневий колір внутрішньої оболонки) потенціалів молекул куркуміну в кетонній та енольній формах, а також молекули декаметоксину (візуалізацію виконано за допомогою програмного пакету Flare™ від Cresset®)

Аналіз розподілу електростатичного потенціалу підтверджує електростатичну природу взаємодії вільних молекул CU і DM. Максимального негативного значення потенціал набуває на атомі О карбонільної групи CU (-13.449 а.о.), а максимального негативного – на атомі азоту DM (8.110 а.о.). Однак збільшення концентрації DM, молекула якого має гідрофобні вуглеводневі "хвости", має приводити до зростання ролі гідрофобних взаємодій в досліджуваній системі, що буде перешкоджати зв'язуванню супрамолекулярних комплексів з гідрофільною поверхнею кремнезему. Експериментально це підтверджується зниженням величин адсорбції куркуміна з початком агрегування декаметоксину в передміцелярній області ($C_{DM} = 0.002 \div 0.1$ М) до мінімальних і постійних значень в області утворення міцел ($C_{DM} \geq KKM$) (рис.8).

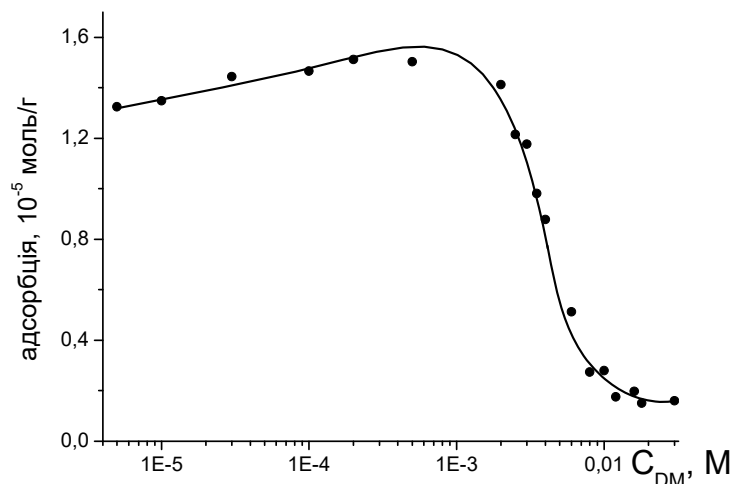


Рис. 8. Залежність адсорбції куркуміну від концентрації DM. $C_{CU}=4 \cdot 10^{-5}M$

Висновки

Знайдено, що супрамолекулярні взаємодії в розчинах декаметоксину приводять до батохромного зсуву смуг поглинання куркуміну у розчинах і гіпсохромного – на поверхні кремнезему, причому ступінь їх змін залежать від концентрації даної катіонної ПАР у водних розчинах. Аналіз зарядів показав, що при взаємодії позитивно заряджений атом азоту декаметоксину посилює поляризацію карбонільної групи куркуміну, що пояснює батохромний зсув його спектрів поглинання в розчині. Зміна λ_{max} спектрів сорбованого куркуміну може бути обумовлена зміною при адсорбції на ВДК просторової орієнтації даного поліфенолу у складі супрамолекулярних комплексів з декаметоксином, оскільки при збільшенні концентрації КПАР горизонтальна орієнтація комплексів переходить у вертикальну.

Значна зміна електростатичного потенціалу на атомах азоту декаметоксину та карбонільної групи куркуміну вказує на електростатичну природу взаємодії цих молекул у вільному стані в розчині. Збільшення концентрації КПАР з гідрофобними вуглеводневими "хвостами" приводить до збільшення вкладу гідрофобних взаємодій в досліджуваній системі. Розрахований розподіл гідрофобного та електростатичного потенціалів молекул свідчить про значний внесок гідрофобних взаємодій як в утворення супрамолекулярних комплексів куркуміну з катіонною ПАР декаметоксином у розчині, так і в їх адсорбцію на поверхні кремнезему.

Література

1. Чуйко А.А. Медицинская химия и клиническое применение диоксида кремния. – Киев : Наукова думка, 2003. – 416 с.
2. Туров В.В., Крупська Т.В., А.П. Головань А.П. та ін. Композитні системи пролонгованої дії на основі подрібнених лікарських рослин та нанокремнеземів // Наука та інновації. – 2017. – Т. 13, № 2. – С. 59–67.
3. Островська Г.В., Крупська Т.В., Пазюк Л.М. та ін. Біометричні дослідження ефективності композитної системи лімфосіліка на основі збору лікарських рослин та нанокремнезему // Biotechnol. acta. – 2020. – Т.13, №3. – С.52–63.

4. Пат. UA 85389 U. Дієтична добавка – засіб для профілактики та лікування екзо- та ендогенних інтоксикацій / Картель М.Т., Туров В.В., Барвінченко В.М., Ліпковська Н.О., Пострелко В.М., Тарас Г.В. – Опубл. 2013.
5. Пат. UA 94526 U. Дієтична добавка «Фітосил» – засіб для лікувально-профілактичного харчування / Барвінченко В.М., Туров В.В., Картель М.Т., Ліпковська Н.О., Новіков В.П., Черпак О.М. – Опубл. 2014.
6. Pulido-Moran M., Moreno-Fernandez J., Ramirez-Tortosa C., Ramirez-Tortosa M. Curcumin and health // *Molecules*. – 2016. – V. 21, N 3. – P. 264–286.
7. Dourado D., Freire D.T., Pereira D.T., et al. Will curcumin nanosystems be the next promising antiviral alternatives in COVID-19 treatment trials? // *Biomed. Pharmacother.* – 2021. – V.139. – P. 111578 – 111585.
8. Ліпковська Н.О., Барвінченко В.М. Супрамолекулярні взаємодії природних флавоноїдів з катіонною ПАР етонієм в розчинах і на поверхні нанокремнезему // *Хімія, фізика та технологія поверхні*. – 2018. – Т.9, № 1. – С. 92– 103.
9. Barvinchenko V.M., Lipkovska N.O., Fedyanina T.V., Pogorelyi V.K. Physico-chemical properties of supramolecular complexes of natural flavonoids with biomacromolecules // *Nanomaterials and Supramolecular Structures: Physics, Chemistry and Applications*. – 2010. – P. 281.
10. Дзюблик І. В., Трохименко О. П., Соловійов С. О. та ін. Ефективність *in vitro* декаметоксину для швидкої інактивації респіраторного коронавірусу // *Фармацевтичний журнал*. – 2022. –Т. 17, № 2. – С. 87–101.
11. Ковальчук В. П., Гуменюк М.І., Біктіміров В.В., Желіба М.Д. Результати експериментального і клінічного дослідження ефективності антисептичного препарату декасану // *Вісн. Вінницького держ. мед. ун-ту*. – 2002. – № 2. –С. 292–294.
12. Бернштейн И. Я., Каминский Ю. Л. Спектрофотометрический анализ в органической химии. – Ленинград, Химия, 1986. – 200 с.
13. Kazakova O., Lipkovska N., Barvinchenko. Keto-enol tautomerism of curcumin in the preparation of nanobiocomposites with fumed silica // *Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy* – 2022 – 277 – P. 121287.
14. MOPAC2016, James J. P. Stewart, Stewart Computational Chemistry, Colorado Springs, CO, USA, <http://OpenMOPAC.net>, 2016.
15. A., Klamt; G., Schüürmann. COSMO: a new approach to dielectric screening in solvents with explicit expressions for the screening energy and its gradient // *J. Chem. Soc. Perkin Trans.2*. – 1993- 2 (5) – P. 799–805. doi:10.1039/P29930000799.
16. Cheeseright T., Mackey M., Rose S., Vinter A. Molecular Field Extrema as Descriptors of Biological Activity: Definition and Validation // *J. Chem. Info. Model.* – 2006. - V. 46, No 2. – P. 665–676.
17. Flare, version 6.0.1, Cresset®, Litlington, Cambridgeshire, UK; <http://www.cresset-group.com/flare/>
18. Bauer M. R., Mackey M. D.; Electrostatic Complementarity as a Fast and Effective Tool to Optimize Binding and Selectivity of Protein–Ligand Complexes // *J. Med. Chem.* – 2019. - V. 62, No 6, P. 3036-3050.
19. Maximilian Kuhn, Stuart Firth-Clark, Paolo Tosco., et al. Assessment of Binding Affinity via Alchemical Free-Energy Calculations // *J. Chem. Inf. Model.* – 2020. – V. 60, No 6, P. 3120–3130.
20. Болотов В.В., Зарєченський М.А., Кобзар Г.Л. Розробка і дослідження твердоконтактного декаметоксин-селективного електроду // *Вісник фармації*. – 2003. – № 3. – С. 29–33.

21. Morokuma, K., Kitaura, K. Energy decomposition analysis of molecular interactions. In: Politzer P., Truhlar D.G. (eds). Chemical applications of atomic and molecular electrostatic potentials. - Plenum Press, New York, 1981. - P. 215-242.

References

1. Chuiko A.A. *Medical Chemistry and Clinical Applications of Silicon Dioxide*. (Kyiv: Naukova Dumka, 2003). [in Russian].
2. Turov V.V., Krupskaya T.V., Golovan A.P., Andriyko L.S., Kartel M.T. Long-acting composite systems based on powdered medicinal plants and nanosilica. *Sci. innov.* 2017. **13**(2): 59.[in Ukrainian].
3. Ostrovskaya G.V., Krupskaya T.V., Pazyuk L.M., Dzerzhinsky N.E., Turov V.V. Biometric studies of the effectiveness of the composite system of lymphosilicon based on the collection of medicinal plants and nanosilicon. *Biotechnol. acta.* 2020. **13** (3):52.[in Ukrainian].
4. Patent UA 85389. Kartel M.T., Turov V.V., Barvinchenko V.M., Lipkovskaya N.O., Postrelko V.M., Taras G.V. Dietary supplement - a tool for the prevention and treatment of exogenous and endogenous intoxications. 2013.
5. Patent UA 94526. Barvinchenko V.M., Turov V.V., Kartel M.T., Lipkovskaya N.O., Novikov V.P., Cherpak O.M. Dietary supplement "Phytosil" - a means of therapeutic and prophylactic nutrition. 2014.
6. Pulido-Moran M., Moreno-Fernandez J., Ramirez-Tortosa C., Ramirez-Tortosa M. Curcumin and health. *Molecules*.2016. **21**(3): 264.
7. Dourado D., Freire D.T., Pereira D.T., Amaral-Machado L., Alencar É.N., de Barros A.L.B., Egito E.S.T. Will curcumin nanosystems be the next promising antiviral alternatives in COVID-19 treatment trials? *Biomed. Pharmacother.* 2021.**139**: 111578.
8. Lipkovska N.O., Barvinchenko V.M. Supramolecular interactions of natural flavonoids with cationic surfactant ethonium in solutions and on silica surface. *Him. Fiz. Tehnol. Poverhni.* 2018. **9**(1): 92. [in Ukrainian].
9. Barvinchenko V.M., Lipkovska N.O., Fedyanina T.V., Pogorelyi V.K. Physico-chemical properties of supramolecular complexes of natural flavonoids with biomacromolecules. *Nanomaterials and Supramolecular Structures: Physics, Chemistry and Applications*, 2010. 281-291.
10. Dziublyk I. V., Trokhymenko O. P., Soloviov S. O., Trokhymenko O. P., Bororova O. L., Yakovenko O. K. Efficacy decametoxin *in vitro* for quick inactivation respiratory coronavirus. *Farmatsevychnyi zhurnal.* 2022. **17**(2): 87. [in Ukrainian].
11. Kovalchuk V.P., Gumenyuk M.I., Biktimirov V.V., Zheliba M.D. Results of an experimental and clinical study of the effectiveness of the antiseptic preparation dekasana. *Visn. Vinnytsia state honey. University.* 2002. (2): 292. [in Ukrainian].
12. Bernshtein I.Ya., Kaminskiy Yu.L. Spectrophotometric analysis in organic chemistry. Leningrad: Khimiya, 1986). [in Russian].
13. O. Kazakova, N. Lipkovska, V. Barvinchenko. Keto-enol tautomerism of curcumin in the preparation of nanobiocomposites with fumed silica. *Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy*, 2022. **277**: 121287.
14. MOPAC2016, James J. P. Stewart, Stewart Computational Chemistry, Colorado Springs, CO, USA, [HTTP://OpenMOPAC.net](http://OpenMOPAC.net), 2016.
15. A., Klamt; G., Schüürmann. COSMO: a new approach to dielectric screening in solvents with explicit expressions for the screening energy and its gradient. *J. Chem. Soc. Perkin Trans.2*, 1993. **2** (5): 799.
16. Cheeseright T., Mackey M., Rose S., Vinter A. Molecular Field Extrema as Descriptors of

- Biological Activity: Definition and Validation. *J. Chem. Info. Model*, 2006. **46**, No 2. – P. 665–676
17. Flare, version 6.0.1, Cresset®, Litlington, Cambridgeshire, UK; <http://www.cresset-group.com/flare/>
 18. Bauer M. R., Mackey M. D. Electrostatic Complementarity as a Fast and Effective Tool to Optimize Binding and Selectivity of Protein–Ligand Complexes. *J. Med. Chem.* - 2019, **62**, 6, 3036-3050;
 19. Maximilian Kuhn, Stuart Firth-Clark, Paolo Tosco, Antonia S. J. S. Mey, Mark Mackey and Julien Michel Assessment of Binding Affinity via Alchemical Free-Energy Calculations *J. Chem. Inf. Model.* 2020, **60**, 6: 3120.
 20. Bolotov V. V., Zarechensky M. A., Kobzar G. L. Development and research of solid-contact decamethoxine-selective electrode. *News of pharmacy*. 2003. **3**: 29. [in Ukrainian].
 21. Morokuma, K., Kitaura, K. Energy decomposition analysis of molecular interactions. In: Politzer P, Truhlar DG (eds), *Chemical applications of atomic and molecular electrostatic potentials* (Plenum Press, New York, 1981)

SPECTRAL AND QUANTUM-CHEMICAL INVESTIGATION OF INTERACTIONS IN SUPRA- MOLECULAR SYSTEMS: CUCUMIN - DECAMETOXIN - SILICA IN AQUEOUS SOLUTIONS

Kazakova O.O., Lipkovska N.O., Barvinchenko V.M.

*Chuiko Institute of SUface Chemistry, National Academy of Sciences of Ukraine
General Naumov street 17, 03164, Kyiv-164
E-mail: kazakova_olga@ukr.net*

The peculiarities of the interaction in the supramolecular system: the natural hydrophobic polyphenol curcumin - the antiseptic cationic surface-active substance decamethoxin - highly dispersed silica was revealed by the spectrophotometric method. It was established that significant changes in the spectral characteristics of curcumin in aqueous solutions and on the surface of the sorbent depend on the concentration of this cationic surfactant, which can exist in the solution in the form of monomers, associates, and micelles. The PM7 method and the COSMO solvation model, implemented in the MOPAC2016 software package were used to determine the mechanism of adsorption of the supramolecular complex of curcumin (in ketone or enol form) with decamethoxine on the silica surface. The distribution of electrostatic and hydrophobic potentials of the studied molecules, calculated by the FieldView 2.0.2 method (Flare software package), indicates a significant contribution of hydrophobic interactions in the formation of supramolecular complexes of curcumin with decamethoxin in solution and on the surface of silica.

The obtained results are of practical importance and can be used in the development of new more effective drugs containing bioactive curcumin, antiseptic decamethoxine and enterosorbent silicon dioxide.

Keywords: *highly dispersed silica, curcumin, decamethoxine, spectrophotometry, quantum chemical simulation*