

ВЗАЄМОДІЯ ОРНІДАЗОЛУ З НАТИВНИМ ТА ФУНКЦІОНАЛІЗОВАНИМИ КРЕМНЕЗЕМАМИ

*Gaidai A. P.*¹, Дем'яненко Є. М.², Фуртат І. М.¹, Вакулук П. В.¹, Козакевич Р. Б.²,
Мурланова Т. В.¹, Лобанов В. В.², Тьортих В. А.²

¹Національний університет «Києво-Могилянська академія», Київ, Україна

²Інститут хімії поверхні ім. О. О. Чуйка НАН України, Київ, Україна
alina.gaidai@ukma.edu.ua

На основі композитів різноманітних антимікробних речовин з неорганічними носіями, що мають високу дисперсність і розвинену питому поверхню, в сприятливих випадках можна створити сучасні наногібридні матеріали комплексної дії, що поєднують лікувальну дію активного компонента з високою адсорбційною здатністю носія, зокрема нанокремнезему. Окрім того, необхідно враховувати, що адсорбція антимікробних сполук може бути одним із ефективних способів створення лікарських препаратів пролонгованої дії з контрольованим виділенням активного компонента, а також дозволяє підвищити біодоступність малорозчинних лікарських засобів і забезпечити синергійний ефект. Своєю чергою, усі зазначені особливості потребують детального експериментального вивчення, насамперед взаємодії нанокompозитних матеріалів на основі кремнезему з конкретними біомолекулами і/чи лікарськими препаратами різних класів. Окрім того, сукупне застосування методів теоретичного моделювання та експериментальних досліджень за умов *in vitro* дозволяє раціонально проектувати геометрію наночастинок носіїв з метою створення ефективних систем контрольованої доставки лікарських засобів до клітин-мішеней. З огляду на викладене вище метою роботи було дослідження особливостей взаємодії орнідазолу з нативним та функціоналізованим (аміновий і метильований) кремнеземом, із використанням квантово-хімічних розрахунків і методу ІЧ-спектроскопії. Комплексні дослідження з використанням квантово-хімічних розрахунків і методу ІЧ-спектроскопії засвідчують, що механізм взаємодії орнідазолу з нативним та функціоналізованими кремнеземами полягає в утворенні водневих зв'язків між атомом Оксигену силанольної групи поверхні кремнезему і атомом Гідрогену гідроксильної групи молекули орнідазолу. У випадку взаємодії з амінованою матрицею зв'язок також виникає між атомом Нітрогену аміногрупи поверхні та орнідазолом. Формування ж комплексу орнідазолу з метильованою матрицею відбувається за рахунок дисперсійних (гідрофобних) взаємодій, якщо силанольні групи замінені триметилсилільними. З'ясовано, що найбільша енергія адсорбції орнідазолу притаманна нативному кремнезему (-87,5 кДж/моль), трохи менша енергія відмічена на амінокремнеземі – -85,2 кДж/моль, тоді як кремнезем з метильними групами на поверхні характеризувався найменшою енергією адсорбції. Найактивнішою щодо взаємодії з силанольною групою кремнезему в молекулі орнідазолу є ОН-група, що утворює водневий зв'язок з силанольною групою кремнезему. Також не виключено одночасне утворення водневих зв'язків силанолів і з іміно та нітро групами орнідазолу. Порівняння ІЧ-спектрів нанокompозитів, після десорбції орнідазолу упродовж 24 год дозволило встановити, що найвищий ступінь вивільнення активної речовини властивий нанокompозитам, створеним на основі нативної, амінованої та частково метильованої (вміст – CH_3 груп на поверхні 30 %) матриці. У нанокompозитах, створених на основі метильованих матриць з вищим вмістом функціональних груп (83 і 100 %), спостерігається зниження вимивання активної речовини, що пояснюється гідрофобізацією поверхні носія.