

ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ МЕХАНИЗМА КОМПЛЕКСООБРАЗОВАНИЯ В СИСТЕМЕ ХИТИН – Pb(II)

Т.В. Солодовник, В.И. Унрод, Б.Ф. Минаев, С.А. Пахарь

Черкасский государственный технологический университет,
Черкассы, Украина, E-mail: soltav@chiti.uch.net

THEORETICAL STUDY OF THE COMPLEX FORMATION MECHANISM IN THE SYSTEM CHITIN – Pb(II)

T.V. Solodovnik, V.I. Unrod, B.F. Minaev, S.A. Pakhar

Cherkassy State Technological University,
Cherkassy, Ukraine, E-mail: soltav@chiti.uch.net

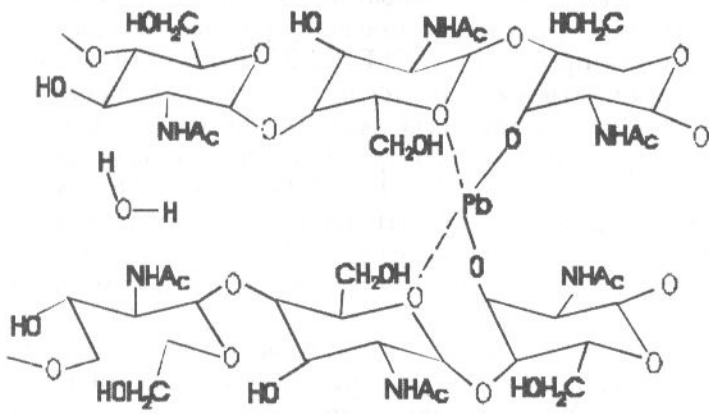
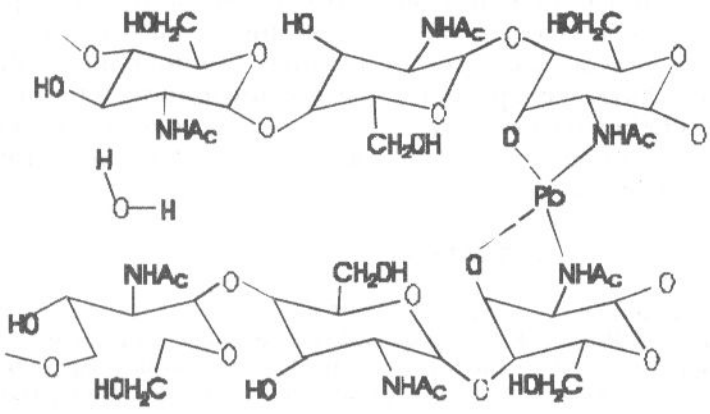
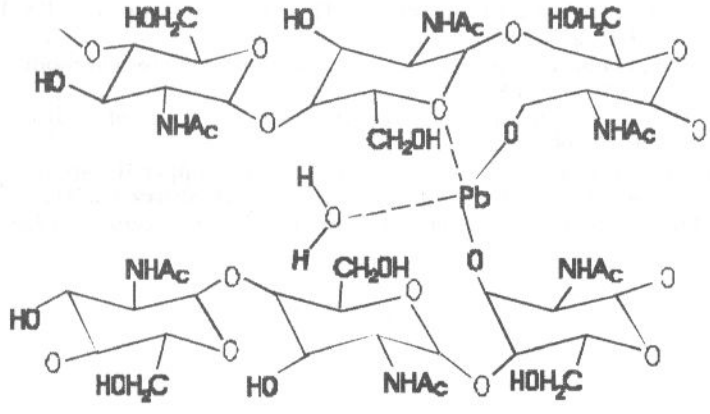
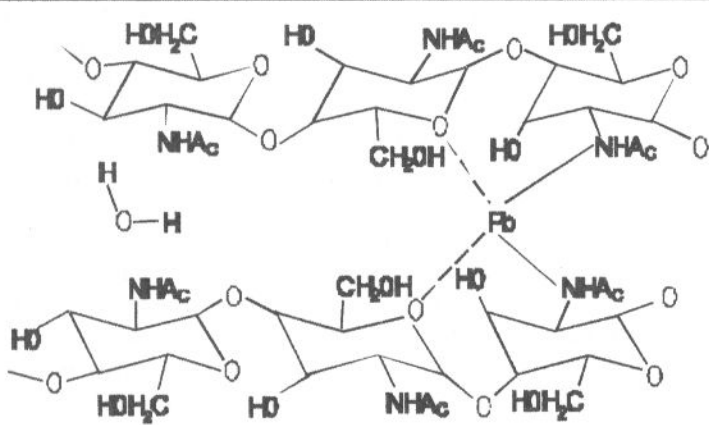
ABSTRACT

Geometry and interaction energy of the complex between Pb(II) ion and different possible coordination sites of chitin were computed using molecular mechanics method (MM+). The calculations have confirmed that the most stable conformations involve the oxygen site of hydroxyl group (C-3) and heterocyclic oxygen site of N-acetyl glucosamine.

Хитин, хитозан и их модифицированные производные широко используются в качестве сорбентов ионов тяжелых металлов. Однако механизм сорбции изучен пока еще недостаточно. Как показано в работах Муззарелли, хитин и хитозан за счет наличия функциональных карбоксильных, гидроксильных, ацетиламидных и амино- групп а также в зависимости от условий сорбируют ионы металлов за счет комплексобразования, ионного обмена или поверхностной сорбции [1,2]. Большинство ученых придерживаются мнения, что основной механизм сорбции – это комплексобразование, которое обусловлено высокой электродонорной способностью атомов азота и кислорода [3].

Целью нашей работы было теоретическое исследование процесса комплексобразования в системе Pb(II) – хитин методом молекулярной механики (MM+) при использовании программы "HyperChem". Метод молекулярной механики MM+ применяется в расчетах органических молекул при использовании классических уравнений механики для представления потенциальной энергии и физических свойств молекул [4]. Моделирование процесса комплексобразования проводилось с участием атомов кислорода и азота с двух трехмерных цепей хитина, молекул воды и иона свинца. Как видно из данных, представленных в таблице, наиболее стойким и, вероятно, возможным с минимальным значением энергии является хелатный комплекс, в образовании которого принимают участие кислород гидроксильной группы при C-3 и кислород гетероцикла N-ацетилглюкозамина.

Результаты расчетов комплексов Pb(II) – хитин методом молекулярной механики

Схема структуры комплекса	E, кДж/моль
	-125,9
	+32,6
	+15,7
	-51,7

Полученные данные хорошо согласуются с более ранними результатами других авторов при изучении процесса комплексообразования на примере образования комплекса “Cd-хитин” в процессе выращивания *Neurospora crassa* на токсичной среде. Моделирование и расчет процесса комплексообразования в данном случае проводили при использовании программы “CERIUS 2” [5]. В представленной работе теоретические расчеты подтверждены исследованиями ИК-спектров.

Французские ученые, изучая комплексы “Cu(II)– N-ацетилглюкозамин” и “Cu(II) – глюкозамин”, которые образуются при получении новых материалов с заданными свойствами, использовали метод Density Functional Theory [6]. Расчеты, проведенные данным методом, также подтверждают наиболее вероятное участие в комплексе кислорода гетероцикла в случае “Cu(II) – N-ацетилглюкозамин”, а в комплексах “Cu(II) – глюкозамин”, предпочтение отдается комплексу с участием азота аминогруппы.

Анализ литературных данных показал, что в настоящее время увеличилось количество работ по теоретическому моделированию процессов комплексообразования металлических ионов на N-ацетилглюкозамине, глюкозамине, хитине, хитозане. Да это и логично, так как использование расчетных методов и прикладных компьютерных программ дает возможность с научной точки зрения подойти к механизму сорбции ионов металлов на природных аминополисахаридах, а также теоретически обосновать экспериментальные данные и логические предположения. В дальнейшем перед нами стоит задача более широкого систематизированного и сравнительного представления данного материала с использованием различных расчетных методов.

ЛИТЕРАТУРА

1. Muzzarelli R.A.A. Chitin. Oxford: Pergamon Press, 1977. 305 p.
2. В.Н. Косяков, И.Е. Велешко, Н.Г. Яковлев, К.В. Розанов, Л.Ф. Горовой. Сорбция радионуклидов хитиновыми сорбентами различного происхождения // Седьмая Международная конференция “Современные тенденции в исследованиях и использовании хитина и хитозана”. Санкт-Петербург. 2003. С. 320–323.
3. Хитин и хитозан. Получение, свойства и применение / Под ред. К.Г. Скрябина, Г.А. Вихоревой, В.П. Варламова. М: Наука, 2002. С. 217–246.
4. Gund P., Barry D.C., Blaney J.M., Conen N.C. Guidelines for publications in molecular modeling related to medicinal chemistry // J. Med. Chem. 1988. V. 31. P. 2230–2234.
5. Bhanoori M., Venkateswerlu G. In vivo chitin-cadmium complexation in cell wall of *Neurospora crassa* // Biochim. Biophys. Acta. 2000. P. 21–28.
6. R. Terreux, M. Domard, C. Viton, A. Domard. Interaction study between copper II ions and chitosan residues by DFT calculation // Advances in Chitin science, V. VIII. Henryk Struszczyk, Alain Domard, Martin G. Peter and Henryk Pospieszny. Eds.: Institute of Plant Protection, Poznan, Poland. 2005. P. 390–394.