

УДК 544.773.42/535.328

Оригинальная статья

Моделирование адсорбционных характеристик фуллереновых дисперсий

О.А. Дюдюн¹, А.А. Комарова¹, К.С. Эльбекьян¹, Г.Д. Дюдюн²

¹ФГБОУ ВО «Ставропольский государственный медицинский университет»

355017, Россия, Ставрополь, ул. Морозова, 6а

²ФГАОУ ВО «Северо-Кавказский федеральный университет»

355017, Россия, Ставрополь, ул. Пушкина, 1

djudjun.olga@gmail.com

DOI: 10.26456/pcascnn/2025.17.386

Аннотация: Механизмы действия фуллеренов на биологические системы ещё не до конца изучены. Фуллерены могут быть модифицированы для повышения их эффективности и безопасности в области медицины и доставке лекарств. К ним могут быть присоединены различные лиганды, повышающие их селективность к определенным типам клеток или тканям. В данной работе проводится компьютерное 3D-моделирование (ArgusLab 4.0.1) коллоидных суспензий и водных дисперсий фуллеренов, полученных способом ультразвукового диспергирования композиций на основе C60, растительного масла (кукурузного) и поливинилового спирта. Гидродинамический радиус частиц измеряли на анализаторе размеров частиц Photocor Compact-Z. Строение соединений подтверждается методами спектрофотометрии (UNICO 2100) и сканирующей электронной микроскопии (микроскоп MIRA-LMN фирмы Tescan). В ходе исследований было спрогнозировано, что фуллерен C60 может выступать в качестве эффективного ингибитора лейкотриеновых рецепторов в живых системах. Лейкотриены – это группа биологически активных веществ, производных арахидоновой кислоты, которые играют важную роль в развитии воспаления и аллергических реакций, особенно в бронхиальной астме. Были оптимизированы трехмерные структуры основных типов лейкотриенов и их молекулярных комплексов с фуллереном C60. Анализ адсорбционных свойств производных фуллерена открывает перспективы для создания новых биологически активных соединений, способных специфически блокировать лейкотриеновые рецепторы и обеспечивать терапевтический эффект без применения гормональных препаратов.

Ключевые слова: коллоидные растворы фуллеренов, фуллереновые дисперсии, ультразвуковое диспергирование, физико-химический анализ, 3D-моделирование, лейкотриены.

Дюдюн Ольга Анатольевна – к.х.н., доцент кафедры общей и биологической химии, ФГБОУ ВО «Ставропольский государственный медицинский университет»

Комарова Анастасия Андреевна – ассистент кафедры общей и биологической химии, ФГБОУ ВО «Ставропольский государственный медицинский университет»

Эльбекьян Карина Сергеевна – д.б.н., профессор, заведующий кафедрой общей и биологической химии, ФГБОУ ВО «Ставропольский государственный медицинский университет»

Дюдюн Глеб Дмитриевич – студент 4 курса факультета Математики и компьютерных наук имени профессора Н.И. Червякова ФГАОУ ВО «Северо-Кавказский федеральный университет»

Original paper

Simulation-adsorption characteristics of fullerene dispersions

O.A. Dyudyun¹, A.A. Komarova¹, K.S. Elbekyan¹, G.D. Dyudyun²

¹Stavropol State Medical University, Stavropol, Russia

²North-Caucasian Federal University, Stavropol, Russia

DOI: 10.26456/pcascnn/2025.17.386

Abstract: Mechanisms of action of fullerenes on biological systems are not yet fully understood. Fullerenes can be modified to increase their efficiency and safety in medicine and drug delivery. Various ligands can be attached to them increasing their selectivity to certain types of cells or tissues. In this work, computer 3D modeling (ArgusLab 4.0.1) of colloidal suspensions and aqueous dispersions of fullerenes obtained by ultrasonic dispersion of compositions based on C60, vegetable oil (corn) and polyvinyl alcohol is carried out. The hydrodynamic radius of particles was measured on a Photocor Compact-Z particle size analyzer. The structure of the compounds is confirmed by spectrophotometry

© О.А. Дюдюн, А.А. Комарова, К.С. Эльбекьян, Г.Д. Дюдюн, 2025

(UNICO 2100) and scanning electron microscopy (MIRA-LMH microscope from Tescan). The studies predicted that fullerene C60 can act as an effective inhibitor of leukotriene receptors in living systems. Leukotrienes are a group of biologically active substances, derivatives of arachidonic acid, which play an important role in the development of inflammation and allergic reactions, especially in bronchial asthma. Three-dimensional structures of the main types of leukotrienes and their molecular complexes with fullerene C60 were optimized. Analysis of the adsorption properties of fullerene derivatives opens up prospects for the creation of new biologically active compounds capable of specifically blocking leukotriene receptors and providing a therapeutic effect without the use of hormonal drugs.

Keywords: colloidal solutions of fullerenes, fullerene dispersions, ultrasonic dispersion, physicochemical analysis, 3D simulation, leukotrienes.

Olga A. Dyudyun – Ph. D., Associate Professor, Department of General and Biological Chemistry, Stavropol State Medical University, ORCID: 0009-0009-9959-397X

Anastasia A. Komarova – Assistant, Department of General and Biological Chemistry, Stavropol State Medical University, ORCID: 0009-0000-2059-6460

Karina S. Elbekyan – Dr. Sc., Professor, Head of the Department of General and Biological Chemistry, Stavropol State Medical University, ORCID: 0000-0003-2403-8663

Gleb D. Dyudyun – 4th year student of the Faculty of Mathematics and Computer Sciences named after Professor N.I. Cherviakov, North-Caucasian Federal University, ORCID: 0009-0008-1256-0204

Поступила в редакцию/received: 10.07.2025; после рецензирования/reviced: 08.08.2025; принята/accepted 10.08.2025.

1. Введение

Наночастицы и наноматериалы открывают огромные перспективы для научных исследований, поскольку позволяют создавать материалы с уникальными свойствами. Однако, экспериментальное изучение таких объектов часто сопряжено с серьёзными трудностями: высокой стоимостью и длительностью экспериментов, сложностями в синтезе или очистке образцов, а также ограниченными возможностями современных приборов для анализа наноразмерных структур.

В таких условиях компьютерное моделирование становится ключевым инструментом для прогнозирования и анализа характеристик наноматериалов. Этот метод опирается на строгие математические алгоритмы и фундаментальные законы физики и химии, что позволяет с высокой точностью предсказывать свойства материалов без необходимости их реального синтеза [1-2].

Среди всего многообразия наночастиц особое место занимают фуллерены – уникальные углеродные структуры, отличающиеся замкнутой сферической или полиэдрической формой. Их свойства обусловлены не только необычной архитектурой молекул, но и широкими возможностями химической модификации, позволяющими создавать обширное семейство производных соединений с заданными характеристиками. Эти соединения демонстрируют высокий потенциал в биомедицинских исследованиях. В частности, их используют в разработке новых лекарственных препаратов, систем доставки лекарств и средств диагностики, что подчеркивает их растущую важность для современной медицины [3-4].

Целью настоящего исследования является комплексное изучение

адсорбционных свойств фуллерена C₆₀ в составе коллоидных суспензий и водных дисперсий на основе поливинилового спирта (ПВС). Особое внимание уделяется анализу взаимодействия между молекулами фуллерена и полимерной матрицей, а также влиянию условий диспергирования на стабильность и функциональные характеристики полученных систем. Важной частью работы станет молекулярное моделирование структуры и динамики фуллерен-ПВС комплексов, что позволит предсказать их свойства и оценить перспективы применения в медицинских технологиях, включая разработку новых терапевтических средств. В дополнение к экспериментальным исследованиям планируется провести компьютерное моделирование биохимической активности фуллереновых дисперсий, направленное на оценку их способности ингибировать лейкотриены – ключевые медиаторы воспалительных процессов. Результаты моделирования послужат теоретическим обоснованием потенциального применения данных систем в фармакологии.

2. Теоретическое обоснование

2.1 Свойства фуллерена C₆₀

Фуллерен C₆₀ представляет собой липофильную молекулу с выраженными электроноакцепторными свойствами, что обусловлено его уникальной электронной структурой. Благодаря высокой реакционной способности, он способен образовывать множество экзоэдрических производных с разнообразными физико-химическими и биологическими свойствами [5, 6]. Ключевой особенностью фуллерена является его «псевдоароматический» характер, который проявляется в специфическом взаимодействии с нуклеофильными агентами и свободными радикалами, приводящем к образованию стабильных аддуктов. При этом химическое поведение C₆₀ во многом аналогично свойствам полиолефинов с дефицитом электронов, что объясняется сочетанием в его каркасе сопряженных π -систем, а также чередованием одинарных (C–C) и двойных (C=C) связей. Такая структура обеспечивает широкие возможности для направленной модификации молекулы, что открывает перспективы для создания новых функциональных материалов и биологически активных соединений [7, 8].

Медицинская химия фуллеренов показывает, что их производные уже нашли своё применение в данной области (подобно другим классам органических соединений) [2]. Производные C₆₀ в водных растворах в зависимости от природы боковой цепи могут образовывать различные наноструктуры (сферы, трубки и пр.). В биологических средах они проявляют двойственную природу: в растворах склонны к образованию наноразмерных агрегатов, а при взаимодействии с клеточными мембранами

демонстрируют способность к диссоциации на меньшие агрегаты и отдельные молекулы. Такое уникальное поведение открывает возможности для управляемой доставки биологически активных веществ. Кроме этого, функциональные группы производных фуллерена можно использовать в качестве модификаторов или в качестве сшивающих агентов в полимерных системах.

Существует несколько эффективных подходов для включения фуллеренов в биологические системы, каждый из которых обладает уникальными преимуществами. Можно использовать суспензии фуллерита (200-1000 нм) или коллоидные дисперсии в воде (50-600 нм) (nano-C₆₀). Другой способ – приготовление водорастворимых композиций – ковалентных производных, содержащих полярные группы, или супрамолекулярных комплексов с полимерами. К тому же, используя различные полимеры в сочетании с производными фуллеренов, можно получать комплексы с различной растворимостью в воде и способностью к агрегации. Также фуллерены позволяют синтезировать соединения, наиболее подходящие для конкретных биологических мишеней [2]. Фуллерены можно включать в липосомы, инкапсулировать в мицеллы, растворять в полиэтиленгликоле и солюбилизировать путём образования комплексов с дисахаридами [3-4].

Одним из наиболее удобных способов является синтез дендримерных аддуктов. При данном способе появляется возможность введения нескольких полярных групп. Но в этом случае также происходит высокая степень экранирования поверхности фуллерена объёмными ветками дендримера. Причём добавление липофильного октадецилового остатка приводит к образованию соединения с ярко выраженным амфифильным характером, которое может реагировать с образованием крупных кластеров [5-6].

Итак, молекула фуллерена характеризуется высокой липофильностью, сильным сродством к электрону, большой площадью поверхности и способностью к самоассоциации с образованием кластеров, что обуславливает многие известные биологические эффекты [9-10]. Следовательно, моделирование дисперсий на основе фуллеренов с терапевтическими агентами может способствовать улучшению их биодоступности и фармакокинетики, что позволит использовать данные дисперсии для создания систем адресной доставки лекарственных веществ.

2.2 Лейкотриены

Лейкотриены (ЛТ) – это группа липидных высокоактивных веществ, образующихся в организме из арахидоновой кислоты. Установлено, что ЛТ связываются с рецепторами, локализованными на плазматических

мембранах клеток. В группу ЛТ входят шесть разновидностей лейкотриенов – *A*, *B*, *C*, *D*, *E* и *F*. Все они содержат карбоксильную группу, в основной цепочке содержат 20 атомов углерода и 4 двойные связи (поэтому после написания названия лейкотриена, указывают индекс 4), в связи с чем они обозначаются как LTA₄, LTB₄, LTC₄, LTD₄, LTE₄, и LTF₄ (в русскоязычных текстах – соответственно ЛТА₄, ЛТВ₄, ЛТС₄, ЛТЕ₄, ЛТФ₄) [11]. ЛТ имеют определенные различия в своем строении, на рис. 1 представлены некоторые из основных представителей класса.

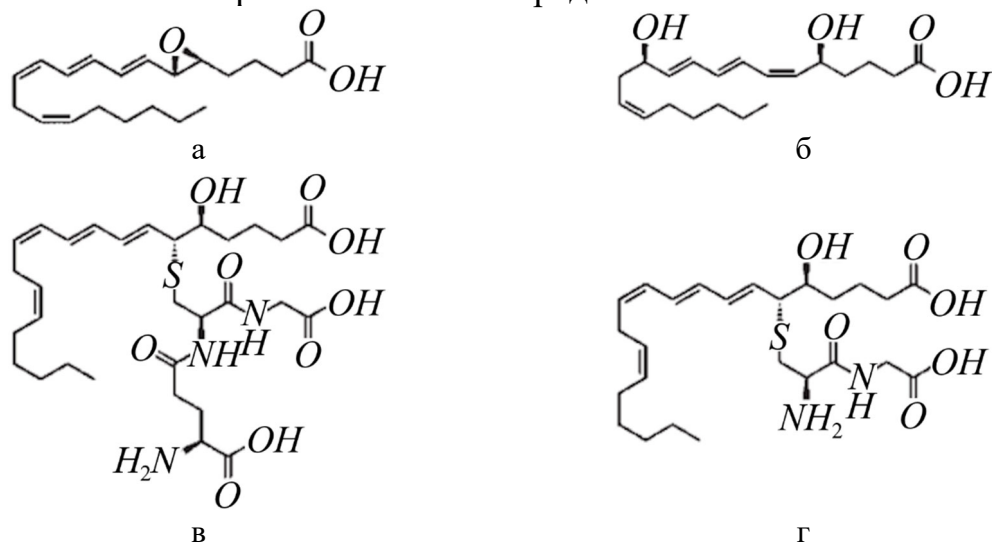


Рис. 1. Лейкотриены: а – *A*₄, б – *B*₄, в – *C*₄, г – *D*₄.

В частности, ЛТ *A*₄ содержит эпоксидную группу, ЛТ *B*₄ содержит гидроксильную группу, ЛТ *C*₄ содержит глутатион, т. е. трипептид гамма-глутамилцистеилглицин, ЛТ *D*₄ содержит лишенный глутамата глутатион, т.е. цистеилглицин, ЛТ *E*₄ содержит только цистеин, а ЛТ *F*₄ содержит гамма-глутамилцистеин, т. е. глутамин, лишенный глицина. В связи с этим выделяют две группы лейкотриенов: 1-я группа CysLT – это пептидные или цистеиновые лейкотриены, или цистеил-лейкотриены (ЛТ *C*₄, ЛТ *D*₄, ЛТ *E*₄) и 2-я группа – лейкотриены без пептидов (ЛТ *A*₄, ЛТ *B*₄). Оказалось, что медленно реагирующие вещества анафилаксии (МРВА) – это, в основном, ЛТ *C*₄ и ЛТ *E*₄. ЛТ синтезируются во всех клетках крови кроме эритроцитов, а также в адвентиции сосудов легких. При этом цистеил-лейкотриены (CysLT), т.е. ЛТ *C*₄, ЛТ *E*₄ синтезируются тучными клетками, эозинофилами, базофилами и альвеолярными макрофагами. Метаболизм лейкотриенов, в том числе лейкотриенов первой группы, т.е. Cys-LTs, или пептид-лейкотриенов происходит относительно быстро (в пределах 2 часов) преимущественно в печени [12]. ЛТ оказывают разнообразное воздействие на клетки, в основном, через связывание со специфическими рецепторами на их поверхности, они играют важную роль в развитии воспалительных и

аллергических заболеваний, таких как бронхиальная астма. У больных астмой повышен уровень лейкотриенов в дыхательных путях, что способствует развитию бронхоспазма, увеличению секреции слизи и другим симптомам.

Исходя из этого большую актуальность приобретает прогнозирование возможности использования аддуктов фуллеренов в качестве ингибиторов аллергического воспаления, активаторами которого являются в том числе и лейкотриены. Поскольку ЛТ являются медиаторами воспаления, можно предположить, что взаимодействие фуллеренов с ЛТ рецепторами может оказывать противовоспалительное действие, а моделирование таких молекулярных комплексов поможет проанализировать все их структурные звенья и, впоследствии, подобрать альтернативный известным метод воздействия на процесс бронхоспазма [13-14]. Изучение же адсорбционных характеристик фуллереновых аддуктов представляет возможность синтеза биологически активных соединений, которые способны блокировать лейкотриеновые рецепторы и ликвидировать эффект бронхоспазма без использования гормональных препаратов.

3. Материалы и методы

В работе использован комбинированный подход с привлечением различных экспериментальных методов.

Масло кукурузное богато как мононенасыщенными (олеиновая), так и полиненасыщенными (линолевая, линоленовая) высшими жирными кислотами, которые сочетают химические свойства олефинов и карбоновых кислот. Они имеют в своей структуре гидрофобный углеводородный радикал, который может взаимодействовать с фуллеренами, обеспечивая их растворение.

Коллоидные суспензии фуллеренов на основе растительного масла (кукурузного рафинированного) были получены нами способом ультразвукового диспергирования (УЗ-диспергирования) смеси фуллеренов (0,1 мас.%) в ультразвуковой камере Elmasonic S10H при температуре 50°C и частоте 37 кГц (временной диапазон 15-60 мин) [15]. С целью повышения гидрофильности фуллерена были приготовлены композиции на основе синтезированного высокодисперсного фуллеренового масла и 1% раствора поливинилового спирта (ПВС марки 098-15 (G) фирмы «SS HSM Industrial») методом УЗ- диспергирования (50°C, 60 мин) с последующим делением фаз при помощи делительной воронки. Спектры пропускания были получены на спектрофотометре UNICO 2100 с длиной оптического пути 1 мм. Гидродинамический радиус частиц был измерен на анализаторе размеров частиц Photocor Compact-Z. Структуры гидрогелевых плёнок фуллереновых дисперсий толщиной 0,1 мм далее были исследованы методом

сканирующей электронной микроскопии (СЭМ) на микроскопе MIRA-LMN фирмы Tescan в лаборатории Северо-Кавказского федерального университета.

Для создания теоретических моделей, а также проведения квантово-химических расчётов использовали программу для молекулярного 3D-моделирования ArgusLab (версия 4.0.1) [16]. Программа позволяет проводить расчеты геометрических и электронных, характеристик молекул, межмолекулярных комплексов и наноструктур, а также вычислять энергию переходных состояний комплексов. Это позволяет предсказывать свойства химических соединений (в том числе лекарств), такие как возможность связывания с мишенью, биодоступность, метаболизм и токсичность, что помогает оптимизировать структуру молекулы для достижения максимальной эффективности.

4. Результаты и обсуждение

4.1 Характеристики молекулярных комплексов

В ходе эксперимента были получены спектры пропускания двух фаз в масляной и водной фракциях соответственно (спектрофотометр UNICO 2100) (см. рис. 2). Обнаруженные идентичные максимумы поглощения (340 нм) свидетельствуют о присутствии фуллеренов в водной фазе [17].

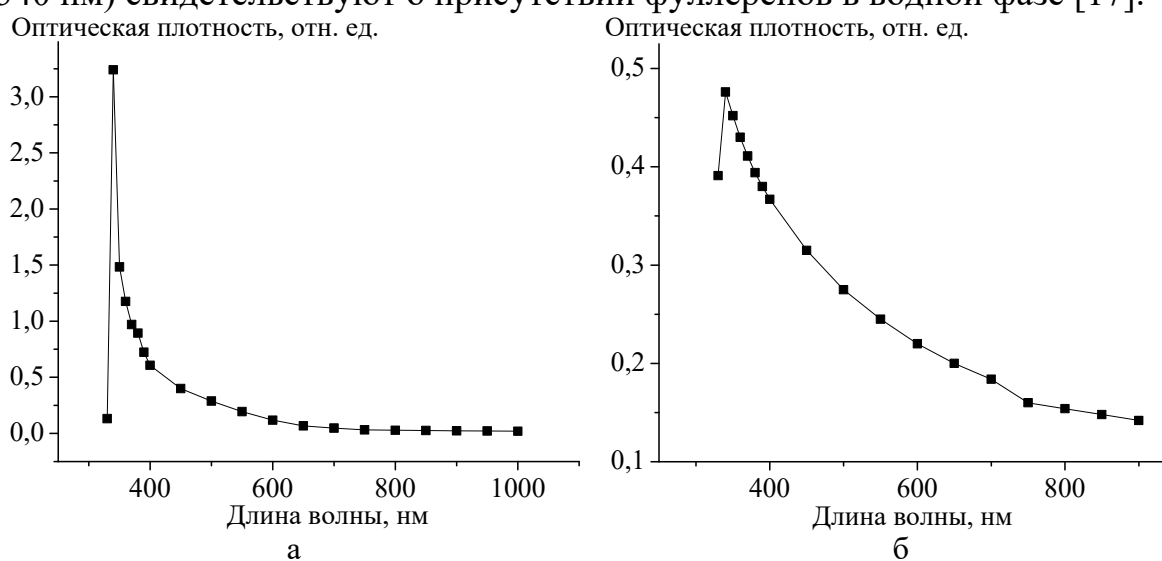


Рис. 2. Спектры пропускания синтезированных образцов: а – масляной коллоидной суспензии фуллеренов, б – водной фуллереновой дисперсии.

В ходе измерения размеров и пространственного распределения кластеров наноуглерода, образующихся при взаимодействии компонентов в водных и неводных средах, было установлено, что увеличение времени диспергирования образцов приводит к эффективному разрушению кластеров и формированию устойчивых микрогетерогенных систем. При этом частицы дисперсной фазы имеют средние размеры до 500 нм, обладают большой межфазной поверхностью и агрегативной устойчивостью

(см. рис. 3, Photocor Compact-Z) [17]. Полученные результаты позволяют оптимизировать параметры получения нанодисперсий, контролировать стабильность систем при хранении и прогнозировать функциональные свойства материалов.

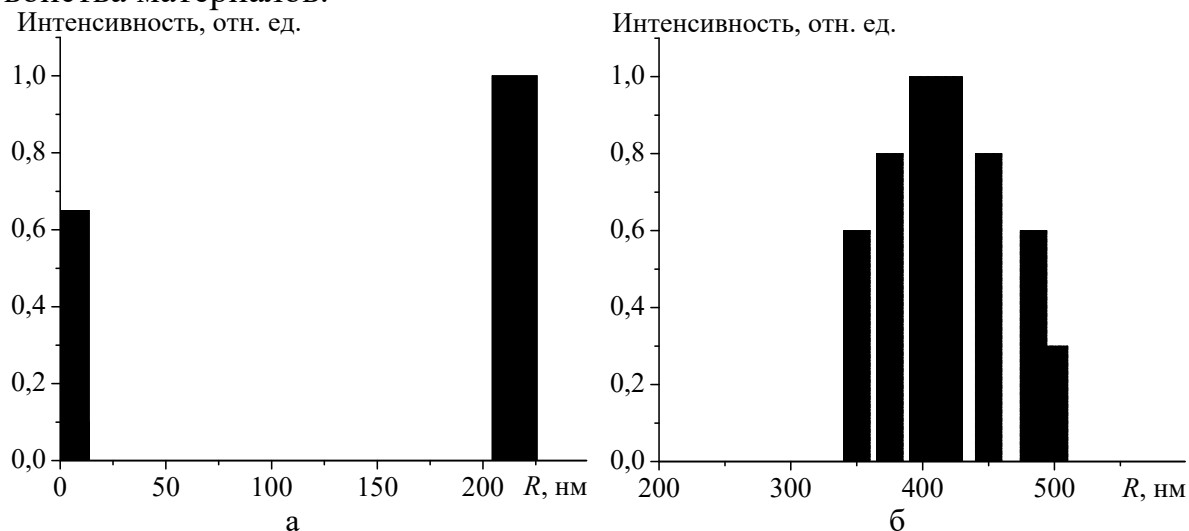


Рис. 3. Гистограммы распределения гидродинамического радиуса частиц: а – в масляной фазе; б – в 1% растворе ПВС.

Далее было выполнено компьютерное моделирование вышеописанных молекулярных комплексов с полной оптимизацией всех геометрических моделей. Оптимизация геометрической структуры производилась с учетом волновой функции системы, определенной методом Хартри Фока (Hartree Fock method). В результате расчётов получены значения полной энергии молекулярного комплекса (E), а также разницы полной энергии составных элементов молекулярной системы и полной энергии самой молекулярной системы (ΔE) (см. Таблицу 1). Отметим, что дальнейшее присоединение молекул олеиновой кислоты идёт с повышением теплового эффекта, а также связано с повышенными требованиями к компьютерному оборудованию.

Таблица 1. Результаты квантово-химических расчётов для комплекса с ОА и ПВС.

| Молекулярная система | Сокращение | E , эВ | ΔE , эВ |
|--|---------------|----------|-----------------------|
| Фуллерен C60 | C60 | 34,83 | $-4,24 \cdot 10^{-6}$ |
| Фуллерен C60 + 1 молекула олеиновой кислоты | (C60_1OA) | 36,78 | $-8,24 \cdot 10^{-6}$ |
| Фуллерен C60 + 2 молекулы олеиновой кислоты | (C60_2OA) | 38,71 | $-7,80 \cdot 10^{-6}$ |
| Олеиновая кислота + фрагмент макромолекулы ПВС | (OA_PVA) | 1,16 | $-1,65 \cdot 10^{-6}$ |
| Фуллерен C60 + 1 молекула олеиновой кислоты + фрагмент макромолекулы ПВС | (C60_1OA_PVA) | 37,41 | $-5,84 \cdot 10^{-6}$ |
| Фуллерен C60 + 2 молекулы олеиновой кислоты + фрагмент макромолекулы ПВС | (C60_2OA_PVA) | 37,89 | $-1,78 \cdot 10^{-6}$ |

Данные расчеты представляют большую ценность для понимания механизма формирования фуллеренами адсорбционных кластеров с

полимерами, а также дает ценную информацию о том, каким образом могут быть сконструированы макромолекулы с привлечением различных механизмов.

На рис. 4 представлен механизм экзоэдрального ковалентного присоединения фрагмента молекулы поливинилового спирта этерифицированного олеиновой кислотой к фуллереновому каркасу.

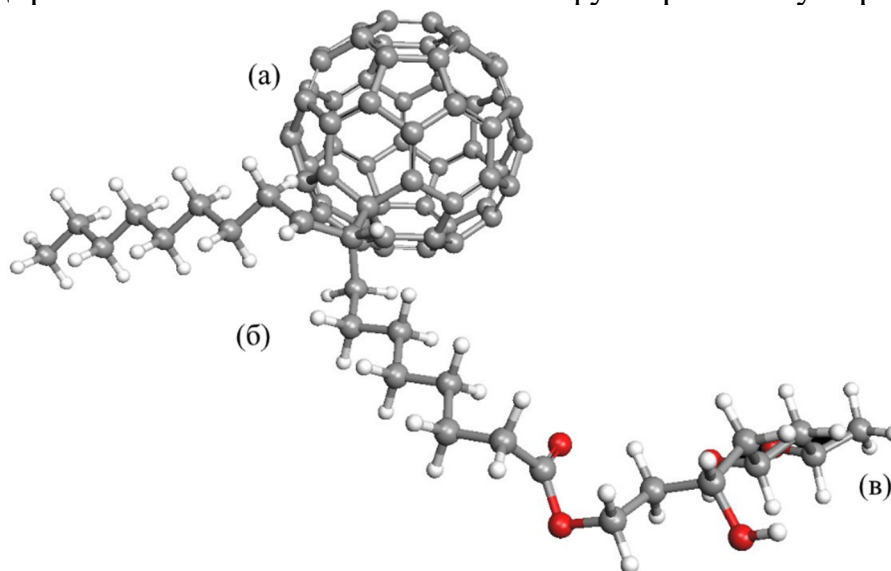


Рис. 4. Оптимизированная 3D-модель молекулярной системы: а – молекула фуллерена C60; б – молекула олеиновой кислоты; в – фрагмент молекулы ПВС.

Для верификации предложенной теоретической модели были исследованы методом сканирующей электронной микроскопии (СЭМ) структуры гидрогелевых плёнок фуллереновых дисперсий, сформированных в чашках Петри путем свободного полива и высушенных в термостате при 50°C в течение 120 мин (микроскоп MIRA-LMN, Tescan) [17]. Полученные микрофотографии представлены на рис. 5.

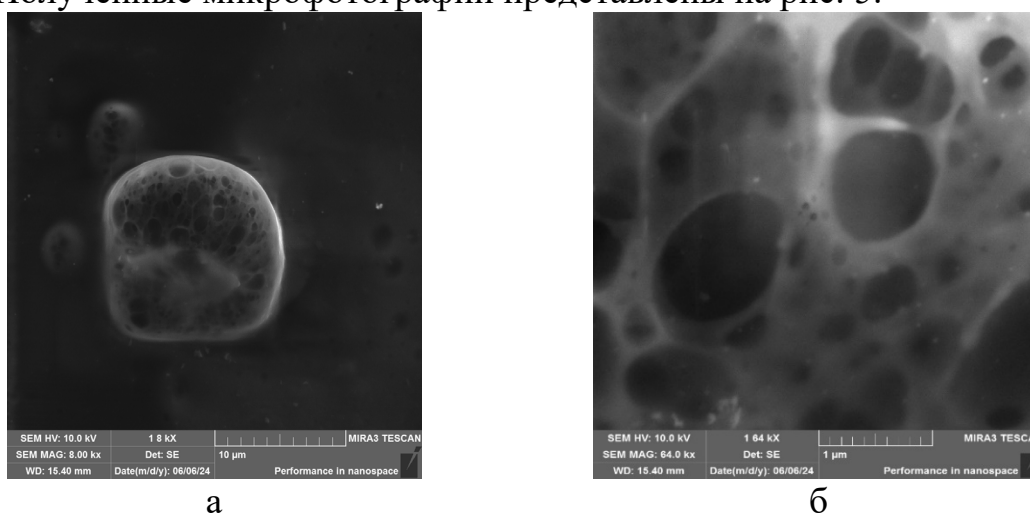


Рис. 5. СЭМ микрофотографии гидрогелевых плёнок фуллереновой дисперсии на основе 1% раствора ПВС (толщиной 0,1 мм) на различных масштабах.

Проведенные исследования выявили следующие структурные

особенности. В 1% растворе ПВС образцы формируют сферические капсулы диаметром до 10 мкм, внутренняя структура капсул содержит равномерно распределённые высокодисперсные частицы, что обеспечивает высокую удельную поверхность и стабильность дисперсной системы. В 4% гидрогидрогеле плотная упаковка полимерных макроцепей создает жесткую пространственную сетку, что обуславливает стерические ограничения. Это приводит к подавлению процесса капсулообразования и изменению механизма распределения наночастиц [17].

4. Моделирование комплексов с лейкотриенами

Аналогично структурам типа (C60_OA) в результате компьютерного моделирования были сконструированы и оптимизированы 3D-модели лейкотриенов (LT_{A4}, LT_{B4}, LT_{C4} и LT_{D4}) и их молекулярных комплексов с фуллереном C60 (см. рис. 6). Результаты квантово-химических расчетов, произведенных на основе данных моделей, представлены в Таблице 2. Из расчетов, представленных в Таблице 2 отчетливо видно, что среди рассмотренных структур LT_{A4} и, соответственно, комплекс (C60_LT_{A4}) выделяются наибольшей полной энергией молекулярного комплекса. Известно, что среди лейкотриенов именно LT_{A4} имеет особое значение, так как является предшественником для синтеза других лейкотриенов, включая цистеил-лейкотриены (LT_{C4}, LT_{D4}, LT_{E4}), которые играют ключевую роль в развитии воспаления и бронхоспазма. LT_{A4} превращается в LT_{C4} под действием фермента глутатион-S-трансферазы, а затем LT_{C4} метаболизируется в LT_{D4} и LT_{E4}.

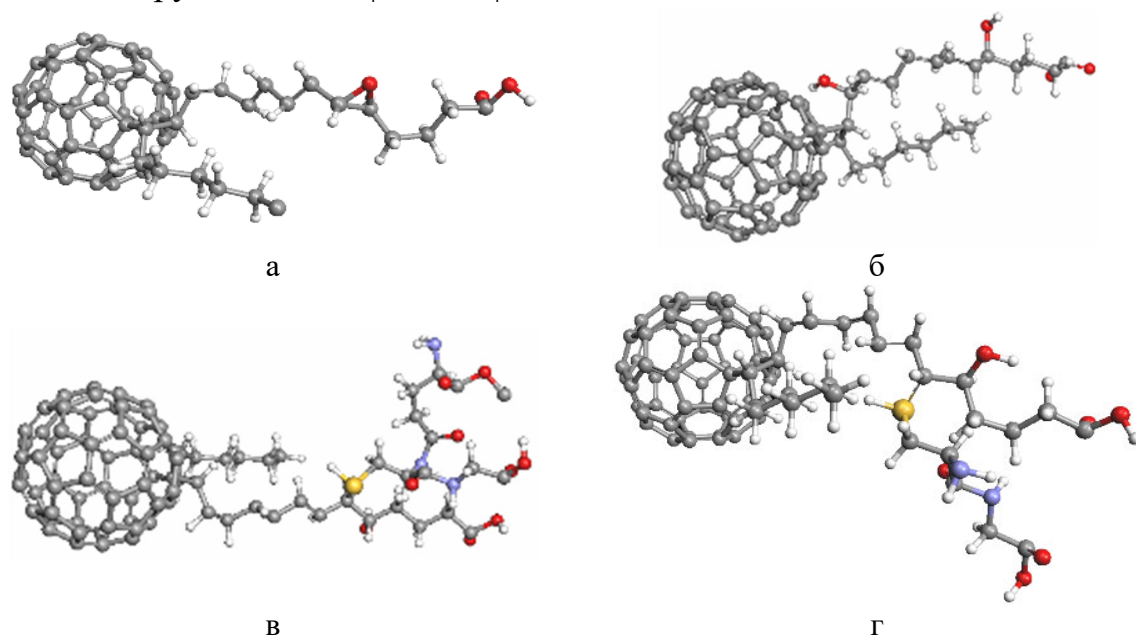


Рис. 6. Оптимизированные 3D-модели молекулярных систем: а – (C60_LT_{A4}); б – (C60_LT_{B4}); в – (C60_LT_{C4}); г – (C60_LT_{D4}).

Таблица 2. Результаты квантово-химических расчётов для комплексов с лейкотриенами.

| Молекулярная система | Сокращение | E , эВ | ΔE , эВ |
|--|---------------------------------------|----------|-----------------------|
| Фуллерен C ₆₀ | C ₆₀ | 34,83 | $-4,24 \cdot 10^{-6}$ |
| Лейкотриен A ₄ | LT A ₄ | 14,97 | $-3,67 \cdot 10^{-6}$ |
| Лейкотриен B ₄ | LT B ₄ | 0,82 | $-0,89 \cdot 10^{-6}$ |
| Лейкотриен C ₄ | LT C ₄ | 3,27 | $-1,46 \cdot 10^{-6}$ |
| Лейкотриен D ₄ | LT D ₄ | 2,18 | $-0,91 \cdot 10^{-6}$ |
| Фуллерен C ₆₀ + лейкотриен A ₄ | (C ₆₀ _LT A ₄) | 52,79 | $-7,51 \cdot 10^{-6}$ |
| Фуллерен C ₆₀ + лейкотриен B ₄ | (C ₆₀ _LT B ₄) | 39,18 | $-7,59 \cdot 10^{-6}$ |
| Фуллерен C ₆₀ + лейкотриен C ₄ | (C ₆₀ _LT C ₄) | 41,36 | $-9,12 \cdot 10^{-6}$ |
| Фуллерен C ₆₀ + лейкотриен D ₄ | (C ₆₀ _LT D ₄) | 40,54 | $-6,61 \cdot 10^{-6}$ |

5. Заключение

В ходе данной работы была предложена и протестирована на практике новая методика формирования коллоидных суспензий и водных дисперсий фуллеренов; смоделированы, получены и проанализированы полимолекулярные ассоциаты, содержащие фуллереновые капсулы в полимерной водорастворимой матрице. Также была предложена и обоснована модель взаимодействия фуллеренов с активаторами воспаления (лейкотриенами ЛТ(LT)) в биологических системах.

Была доказана эффективность предложенного метода для получения растворов фуллеренов в нетоксичных биологически совместимых растворителях, которые могут быть использованы в качестве ингредиентов при синтезе лекарственных препаратов и косметических композиций. Было установлено, что диспергирование и растворение не сопровождаются процессами деструкции молекул фуллерена. А добавление малых количеств углеродных наночастиц в полимерные матрицы может привести к значительным изменениям в поведении композитных материалов на основе полимеров. Данные исследования являются важным шагом в понимании механизма формирования фуллеренами адсорбционных кластеров с полимерами, а также дает ценную информацию о том, каким образом могут быть сконструированы макромолекулы с привлечением различных механизмов. Фуллерены, используемые в исследовании, могут быть модифицированы для повышения их эффективности и безопасности. Например, к ним могут быть присоединены различные лиганды, повышающие их селективность к определенным типам клеток или тканям. В целом, фуллерены представляют собой перспективный инструмент для изучения и, возможно, лечения аллергии, благодаря их уникальным свойствам и способности влиять на ключевые процессы в развитии этого заболевания. Рассмотренный в работе медико-биологический аспект, по

мнению авторов исследования, может существенно помочь врачам-аллергологам, иммунологам, фармацевтам и т.д.

Библиографический список:

1. **Терещенко, В.И.** Квантово-химическое моделирование и расчет электронных структур производных фуллерена / В.И. Терещенко, Н.В. Семакина // *Международный журнал экономики и образования*. – 2022. – Т. 8. – № 1. – С. 114-129.
2. **Пенькова, А.В.** Производные фуллерена как нанодобавки для полимерных композитов / А.В. Пенькова, S.F. Acquah, Л.Б. Пиотровский и др. // *Успехи химии*. – 2017. – Т. 86. – Вып. 6. – С. 530-566. DOI 10.1070/RCR4712.
3. **Андреев, С.М.** Фуллерены: биомедицинский аспект / С.М. Андреев, Е.Н. Башкатова, Д.Д. Пургина и др. // *Иммунология*. – 2015. – Т. 36. – № 1. – С. 57-61.
4. **Fjodorova, N.** How fullerene derivatives (FDs) act on therapeutically important targets associated with diabetic diseases / N. Fjodorova, M. Novič, K. Venko et al. // *Computational and Structural Biotechnology Journal*. – 2022. – V. 20. – P. 913-924. DOI: 10.1016/j.csbj.2022.02.006.
5. **Волкова, Т.О.** Обзор данных о механизмах влияния гидратированных фуллеренов на биологические системы / Т.О. Волкова, С.В. Ширинкин, А.А. Шапошников // *Научные ведомости Белгородского государственного университета. Серия: Естественные науки*. – 2011. – № 21 (116). – С. 64-70.
6. **Ray, A.** Fullerene (C60) molecule – a review / A. Ray // *Asian Journal of Pharmaceutical Research*. – 2012. – V. 2. – I. 2. – P. 47-50. DOI: 10.5958/2231-5691.
7. **Castro, E.** Fullerenes in biology and medicine / E. Castro, A.H. Garcia, G. Zavala, L. Echegoyen // *Journal of Materials Chemistry B*. – 2017. – V. 5. – I. 32. – P. 6523-6535. DOI: 10.1039/C7TB00855D.
8. **Думпис, М.А.** Биологическая активность фуллеренов – реалии и перспективы / М.А. Думпис, Д.Н. Николаев, Е.В. Литасова и др. // *Обзоры по клинической фармакологии и лекарственной терапии*. – 2018. – Т. 16. – № 1. – С. 4-20. DOI: 10.17816/RCF1614-20.
9. **Semenov, K.N.** Evaluation of the C60 biodistribution in mice in a micellar ExtraOx form and in an oil solution / K.N. Semenov, D.A. Ivanova, S.V. Ageev et al. // *Scientific Reports*. – 2021. – V. 11. – Art. № 8362. – 13 p. DOI: 10.1038/s41598-021-87014-3.
10. **Семенов, К.Н.** Растворимость легких фуллеренов в некоторых эфирных и растительных маслах / К.Н. Семенов, Н.А. Чарыков, О.В. Арапов и др. // *Химия растительного сырья*. – 2010. – № 2. – С. 147-152.
11. **Жарких, М.А.** Значение лейкотриенов и антилейкотриеновых препаратов при аллергическом рините / М.А. Жарких, С. Яблонский, М.А. Мокроносова // *Педиатрическая фармакология*. – 2009. – Т. 6. – № 5. – С. 20-29.
12. **Горячкина, Л.А.** Роль антилейкотриеновых препаратов в терапии бронхиальной астмы / Л.А. Горячкина, А.Ю. Насунова // *Consilium Medicum*. – 2014. – Т. 16. – № 3. – С. 9-13.
13. **Артишевский, С.Н.** Антилейкотриеновые препараты в клинической практике / С. Н. Артишевский // *Рецепт*. – 2019. – Т. 22. – № 1. – С. 119-126.
14. **Каратеев, А.Е.** Эйкозаноиды и воспаление / А. Е. Каратеев, Т. Л. Алейникова // *Современная ревматология*. – 2016. – Т. 10. – № 4. – С. 73-86. DOI: 10.14412/1996-7012-2016-4-73-86.
15. **Эльбекьян, К.С.** Метод ультразвукового диспергирования как способ получения композиции фуллеренов на основе растительного масла / К.С. Эльбекьян, А.А. Комарова, О.А. Дюдюн и др. // *Актуальная биотехнология*. – 2020. – № 3 (34). – С. 388.
16. ArgusLab 4.0.1. – Режим доступа: www.url: https://mybiosoftware.com/arguslab-4-0-1-molecular-modeling-graphics-drug-design-program.html. – 30.06.2024.
17. **Дюдюн, О.А.** Получение коллоидных суспензий и водных дисперсий фуллеренов и исследование их физико-химических свойств / О.А. Дюдюн, А.А. Комарова, К.С. Эльбекьян // *Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов*. – 2024. – Вып. 16. – С. 857-863. DOI 10.26456/pcasenn/2024.16.857.

References:

1. Tereshchenko V.I., Semakina N.V. Kvantovo-khimicheskoe modelirovanie i raschet elektronnykh struktur proizvodnykh fullerena [Quantum chemical modeling and calculation of electronic structures of fullerene derivatives], *Mezhdunarodnyj zhurnal ekonomiki i obrazovaniya [International Journal of Economics and Education]*, 2022, vol. 8, no. 1, pp. 114-129. (In Russian).
2. Penkova A.V., Acquah S.F.A., Piotrovskiy L.B. et al. Fullerene derivatives as nano-additives in polymer

- composites, *Russian Chemical Reviews*, 2017, vol. 86, issue 6, pp. 530-566. DOI: 10.1070/RCR4712.
3. Andreev S.M., Bashkatova E.N., Purgina D.D. et al. Fullereny: biomeditsinskij aspekt [Fullerenes: biomedical aspects], *Immunologiya [Immunology]*, 2015, vol. 36, no. 1, pp. 57-61. (In Russian).
 4. Fjodorova N., Novič M., Venko K. et al. How fullerene derivatives (FDs) act on therapeutically important targets associated with diabetic diseases, *Computational and Structural Biotechnology Journal*, 2022, vol. 20, pp. 913-924. DOI: 10.1016/j.csbj.2022.02.006.
 5. Volkova T.O., Shirinkin S.V., Shaposhnikov A.A. Obzor dannykh o mekhanizmaxh vliyaniya gidratirovannykh fullerenov na biologicheskie sistemy [Review of data on the mechanisms of influence of hydrated fullerenes on biological systems], *Nauchnye vedomosti Belgorodskogo gosudarstvennogo universiteta. Seriya: Estestvennye nauki [Belgorod State University Scientific Bulletin. Series: Natural Sciences]*, 2011, no. 21 (116). pp. 64-70. (In Russian).
 6. Ray A. Fullerene (C60) molecule – a review, *Asian Journal of Pharmaceutical Research*, 2012, vol. 2, issue 2, pp. 47-50. DOI: 10.5958/2231-5691.
 7. Castro E., Garcia A.H., Zavala G., Echegoyen L. Fullerenes in biology and medicine, *Journal of Materials Chemistry B*, 2017, vol. 5, issue 32, pp. 6523-6535. DOI: 10.1039/C7TB00855D.
 8. Dumpis M.A., Nikolaev D.N., Litasova E.V. et al. Biologicheskaya aktivnost' fullerenov – realii i perspektivy [Biological activity of fullerenes – reality and prospects], *Obzory po klinicheskoy farmakologii i lekarstvennoj terapii [Reviews on Clinical Pharmacology and Drug Therapy]*, 2018, vol. 16, no. 1, pp. 4-20. DOI: 10.17816/RCF1614-20. (In Russian).
 9. Semenov K.N., Charykov N.A., Arapov O.V. et al. Rastvorimost' legkikh fullerenov v nekotorykh efirnykh i rastitel'nykh maslakh [Solubility of light fullerenes in some essential and vegetable oils], *Khimiya rastitel'nogo syr'ya [Chemistry of Plant Raw Material]*, 2010, no. 2, pp. 147-152. (In Russian).
 10. Semenov K.N., Ivanova D.A., Ageev S.V. et al. Evaluation of the C60 biodistribution in mice in a micellar ExtraOx form and in an oil solution, *Scientific Reports*, 2021, vol. 11, art. no 8362, 13 p. DOI: 10.1038/s41598-021-87014-3.
 11. Zharkih M.A., Yablonskij S., Mokronosova M.A. Znachenie leukotrienov i antileukotriennykh preparatov pri allergicheskom rinite [Leukotrienes and antileukotriene drugs in allergic rhinitis], *Pediatricheskaya farmakologiya [Pediatric Pharmacology]*, 2009, vol. 6, no. 5, pp. 20-29. (In Russian).
 12. Goryachkina L.A., Nasunova A.Yu. Rol' antileukotriennykh preparatov v terapii bronkhial'noj astmy [The role of antileukotriene drugs in the treatment of bronchial asthma], *Consilium Medicum*, 2014, vol. 16, no. 3, pp. 9-13. (In Russian).
 13. Artishevskij, S.N. Antileukotriennyye preparaty v klinicheskoy praktike [Antileukotriene drugs in clinical practice], *Recept [Recipe]*, 2019, vol. 22, no. 1, pp. 119-126. (In Russian).
 14. Karateev A.E., Alejnikova T. L. Ejkozanoidy i vospalenie [Eicosanoids and inflammation], *Sovremennaya revmatologiya [Modern rheumatology]*, 2016, vol. 10, no. 4, pp. 73-86. DOI: 10.14412/1996-7012-2016-4-73-86. (In Russian).
 15. Elbekyan K.S., Komarova A.A., Dyudyun O.A. et al. Metod ul'trazvukovogo dispergirovaniya kak sposob polucheniya kompozitsii fullerenov na osnove rastitel'nogo masla [Ultrasonic dispersion method as a method for obtaining a composition of fullerenes based on vegetable oil], *Aktualnaja biotekhnologiya [Topical biotechnology]*, 2020, № 3 (34), p. 388. (In Russian).
 16. ArgusLab 4.0.1. Available at: [www.url: https://mybiosoftware.com/arguslab-4-0-1-molecular-modeling-graphics-drug-design-program.html](https://mybiosoftware.com/arguslab-4-0-1-molecular-modeling-graphics-drug-design-program.html). (accessed 30.06.2024).
 17. Dyudyun O.A., Komarova A.A., El'bek'yan K.S. Poluchenie kolloidnykh suspenzij i vodnykh dispersij fullerenov i issledovanie ikh fiziko-khimicheskikh svojstv [Obtaining fullerene dispersions and investigation of their physical and chemical properties], *Fiziko-khimicheskie aspekty izucheniya klasterov, nanostruktur i nanomaterialov [Physical and chemical aspects of the study of clusters, nanostructures and nanomaterials]*, 2024, issue 16, pp. 857-863. DOI: 10.26456/pcascnn/2024.16.857. (In Russian).