

УДК 622.276.652

Оригинальная статья

Исследование процесса полимерной стабилизации смешанного оксида железа амилопектином

А.А. Нагдалян, П.С. Леонтьев, А.Б. Голик, А.С. Аскерова, А.М. Серов, А.В. Татов

ФГАОУ ВО «Северо-Кавказский федеральный университет»

355009, Россия, Ставрополь, ул. Пушкина, 1

anagdalian@ncfu.ru

DOI: 10.26456/pcascnn/2024.16.951

Аннотация: В данной работе образцы смешанного наноразмерного оксида железа, стабилизированного амилопектином, получали методом химического осаждения в водной среде. Это соединение обладает большим спектром применения в биомедицинских технологиях и устройствах хранения и преобразования энергии, из-за своих супермагнитных свойств. Были проведены исследования микроструктуры методом сканирующей электронной микроскопии и фазового состава дифрактометрическим методом, а также компьютерное квантово-химическое моделирование взаимодействия амилопектина и смешанного наноразмерного оксида железа. В ходе исследования фазового состава установлено, что образец представляет собой смешанный оксид железа Fe_3O_4 с кубической гранецентрированной решёткой и пространственной группой $Fd3m$. Исходя из анализа микроструктуры установлено, что образец формируется из частиц диаметром от 24 до 54 нм. В результате компьютерного квантово-химического моделирования установлено, что взаимодействие наночастиц оксида железа с амилопектином является энергетически выгодным и химически стабильным. Наиболее вероятным является взаимодействие через гидроксильную группу, присоединённую к C_2 первого A -связанного остатка глюкопиранозы, так как при данном взаимодействии наблюдаются оптимальные значения полной энергии ($E = -3839,330$ ккал/моль) и химической жёсткости ($\eta = 0,159$ эВ).

Ключевые слова: наночастицы, метод совместного осаждения, оксид железа (III), сканирующая электронная микроскопия, стабилизатор.

1. Введение

На сегодняшний день наночастицы оксида железа (III) нашли широкое применение в различных областях промышленности благодаря своим супермагнитным свойствам [1-3]. Так, наночастицы Fe_3O_4 , также известные как магнетит, используются при создании терабитных магнитных запоминающих устройств и датчиков, в процессах катализа, суперпарамагнитной релаксометрии, высокочувствительной биомолекулярной магнитно-резонансной томографии, визуализации с использованием магнитных частиц, гипертермии магнитной жидкостью, разделения биомолекул и целенаправленной доставки лекарств для медицинской диагностики и терапии [4-7].

Наноразмерный оксид железа имеет потенциал для использования в агропромышленном комплексе [8, 9]. Магнетит может способствовать увеличению роста и урожайности растений и улучшению поглощения воды и питательных веществ корнями растений [10-12]. Наночастицы Fe_3O_4 также используются для улучшения питательного статуса почвы и ее

структуры и контроля уровня ее влажности [13,14]. Помимо этого, наночастицы Fe_3O_4 используют в качестве носителей для пестицидов [15]. Для улучшения устойчивости наночастицы оксида железа (III) их стабилизируют различными полисахаридами, например, агар-агаром, мальтодекстрином, амилопектином, хитозаном, метилцеллюлозой, гидроксипропилцеллюлозой [16,17]. Данные полисахариды обладают биологической активностью и необходимы растениям для более быстрого усвоения питательных веществ и воды клетками [18,19] и выполняют каркасную, защитную, резервную, или энергетическую функции в растениях [20]. Клетчатка составляет основную массу клеточных стенок растений [21]. Пектиновые вещества выполняют функции склеивающего материала и опоры тканей [22]. Они предохраняют растения от высыхания, повышая засухоустойчивость и морозостойкость [23].

Таким образом, наночастицы Fe_3O_4 , стабилизированные полисахаридами, могут оказывать положительное воздействие на рост и урожайность растений, а также улучшают структуру почвы. Именно поэтому получение стабилизированных наночастиц Fe_3O_4 является одной из ключевых задач агропромышленного комплекса. Ввиду актуального применения данного материала целью работы стали синтез наночастиц оксида железа (III) и исследование процесса стабилизации наночастиц Fe_3O_4 амилопектином.

2. Экспериментальная часть

Образцы наночастиц (НЧ) Fe_3O_4 были получены с помощью метода совместного осаждения солей железа (II) и (III) (метод Массара), в качестве стабилизатора выступил амилопектин. Сначала был получен водный раствор смеси хлорида железа (III), сульфата железа (II) и амилопектина. Далее полученную смесь нагревали при постоянном перемешивании до 75-80°C и по капле в вытяжном шкафу добавляли раствор гидроксида аммония (25%-й водный раствор), пока весь раствор не превратится в суспензию чёрного цвета. Далее добавляли к полученной суспензии 10 мл дистиллированной воды и ставили колбу с образовавшейся смесью на постоянный магнит на 30 минут. Далее промывали образец дистиллированной водой до тех пор, пока pH промывочного раствора не достигнет значения 7,5-8,5. Для исследования фазового состава и микроструктуры образцы исследовали методом рентгенофазового анализа (на рентгеновском дифрактометре PANalytical Empyrean, Нидерланды) и сканирующей электронной микроскопией (на MIRA-LMN фирмы Tescan, Чехия).

Квантово-химическое моделирование взаимодействия оксида железа

с амилопектином проводилось в программном обеспечении QChem [24] с помощью молекулярного редактора – IQmol [25], с использованием следующих параметров построения: расчет – Energy, метод – HF, базис: 6-31G, convergence – 5, силовое поле – Gchemical.

3. Обсуждение результатов

Было проведено исследование фазового состава полученных образцов, результаты представлены на рис. 1. Из результатов, полученных после рентгенофазового анализа, можно сделать вывод, что образец представляет собой смешанный оксид железа с кубической гранецентрированной решеткой и пространственной группой $Fd3m$.

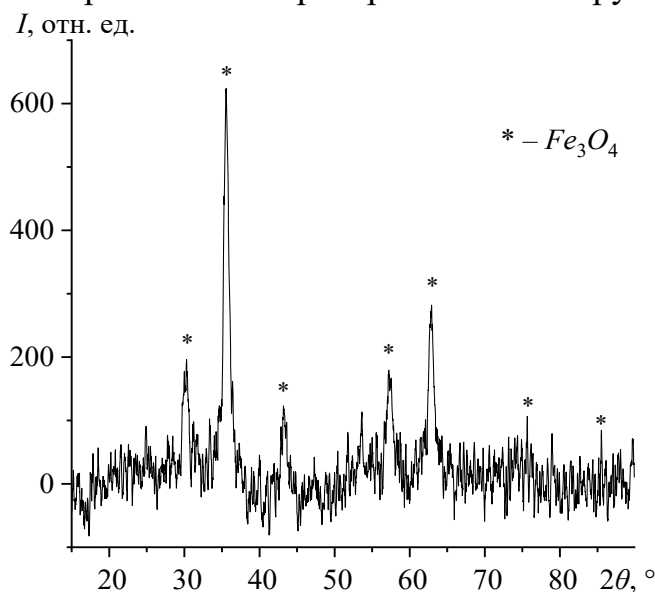


Рис. 1. Дифрактограмма смешанного наноразмерного оксида железа, стабилизированного амилопектином.

Далее образцы исследовали микроструктуру наноразмерного оксида железа при помощи сканирующего электронного микроскопа, полученные результаты измерений представлены на рис. 2. При анализе полученных СЭМ-микрофотографий выявлено, что образец оксида железа представляет собой агрегаты неправильной формы размером от 18,5 до 44,9 мкм, которые, в свою очередь, состоят из наночастиц диаметром от 24 до 54 нм.

Также было проведено квантово-химическое моделирование взаимодействия Fe_3O_4 и амилопектина, результаты представлены в Таблице 1 и на рис. 3. Анализ полученных результатов позволил сделать вывод, что взаимодействие наночастиц оксида железа с амилопектином является энергетически выгодным ($E < 3839$ ккал/моль) и химически стабильным ($0,134 \leq \eta \leq 0,159$ эВ). Наиболее вероятной конфигурацией взаимодействия является соединение через гидроксильную группу, присоединённую к C_2 первого A -связанного остатка глюкопиранозы, так

как при данном взаимодействии наблюдаются оптимальные значения полной энергии ($E = -3839,330$ ккал/моль) и химической жёсткости ($\eta = 0,159$ эВ). Полученные модели представлены на рис. 3.

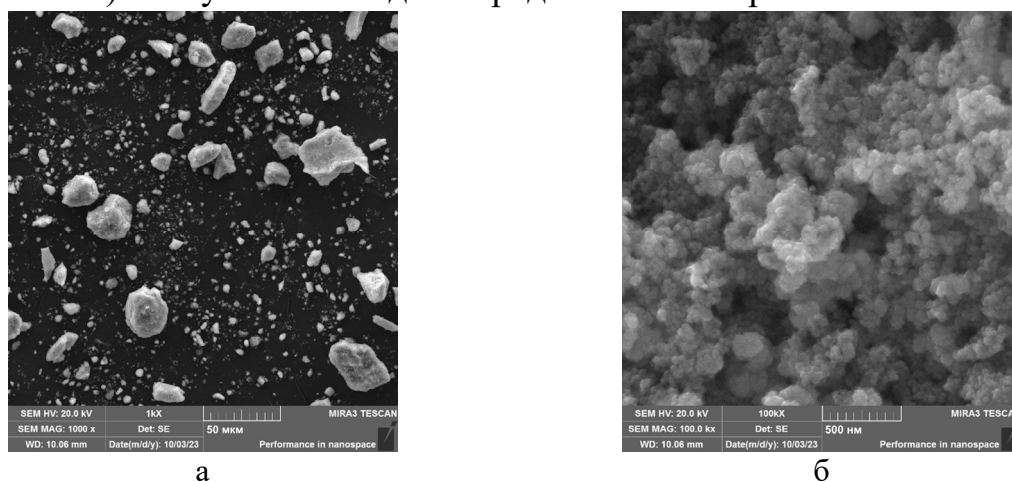


Рис. 2. СЭМ-микрофотографии образцов наноразмерного оксида железа, стабилизированного амилопектином: а – $\times 1000$, б – $\times 100000$.

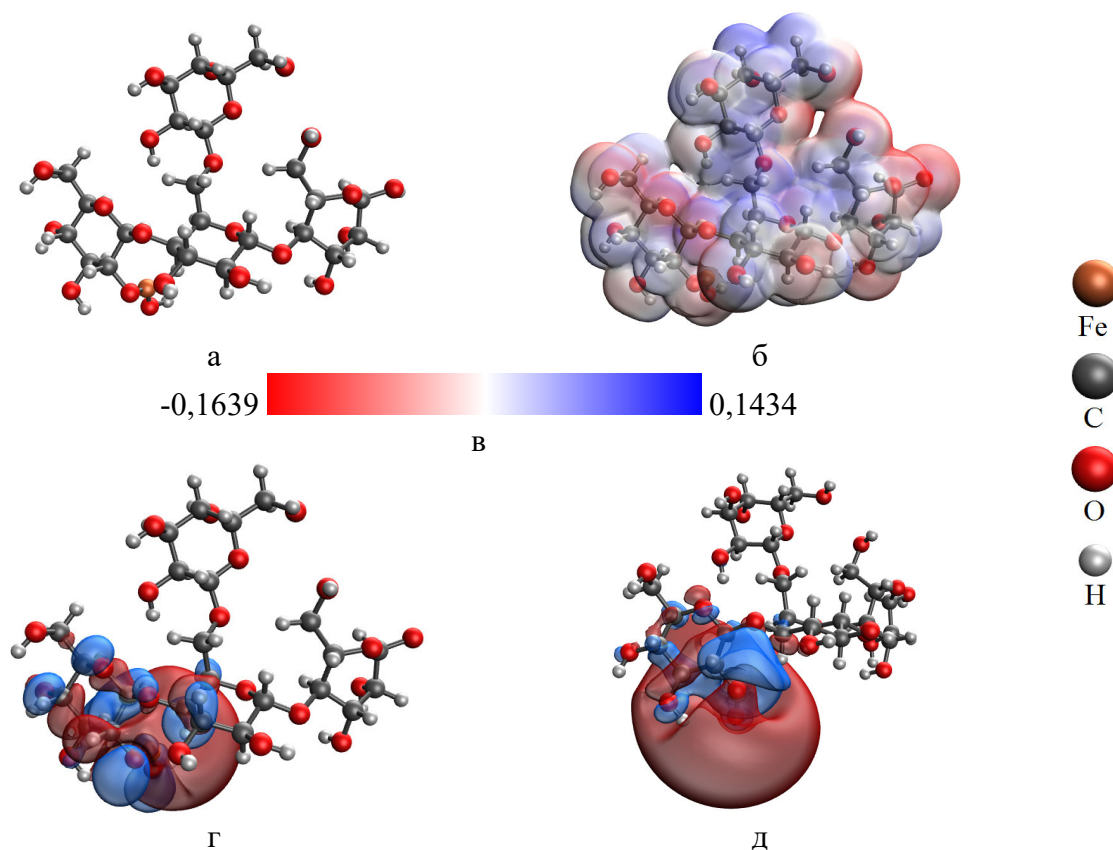


Рис. 3. Результаты моделирования взаимодействия молекулы амилопектина и оксида железа (II) через гидроксильную группу, присоединённую к C_2 первого A -связанного остатка глюкопиранозы: а – модель молекулярного комплекса; б – распределение электронной плотности; в – градиент распределения электронной плотности; г – высшая заселённая молекулярная орбиталь; д – низшая свободная молекулярная орбиталь.

Таблица 1. Результаты компьютерного квантово-химического моделирования взаимодействия наночастиц оксида железа с амилопектином.

Взаимодействие с амилопектином через гидроксильную группу, присоединённую к	E , ккал/моль	E_{HOMO} , эВ	E_{LUMO} , эВ	η , эВ
C_6 В-связанного остатка глюкопиранозы	-3839,293	-0,207	0,103	0,155
C_3 В-связанного остатка глюкопиранозы	-3839,183	-0,192	0,082	0,137
C_2 В-связанного остатка глюкопиранозы	-3839,275	-0,220	0,093	0,157
C_6 первого А-связанного остатка глюкопиранозы	-3839,251	-0,141	0,126	0,134
C_3 первого А-связанного остатка глюкопиранозы	-3839,188	-0,210	0,082	0,146
C_2 первого А-связанного остатка глюкопиранозы	-3839,330	-0,238	0,079	0,159
C_3 второго А-связанного остатка глюкопиранозы	-3839,265	-0,205	0,094	0,150
C_2 второго А-связанного остатка глюкопиранозы	-3839,252	-0,222	0,088	0,155
C_6 третьего А-связанного остатка глюкопиранозы	-3839,307	-0,148	0,136	0,142
C_3 третьего А-связанного остатка глюкопиранозы	-3839,274	-0,199	0,083	0,141
C_2 третьего А-связанного остатка глюкопиранозы	-3839,302	-0,241	0,073	0,157

Анализ полученных результатов позволил сделать вывод, что взаимодействие наночастиц оксида железа с амилопектином является энергетически выгодным ($E < 3839$ ккал/моль) и химически стабильным ($0,134 \leq \eta \leq 0,159$ эВ). Наиболее вероятной конфигурацией взаимодействия является соединение через гидроксильную группу, присоединённую к C_2 первого А-связанного остатка глюкопиранозы, так как при данном взаимодействии наблюдаются оптимальные значения полной энергии ($E = -3839,330$ ккал/моль) и химической жёсткости ($\eta = 0,159$ эВ). Полученные модели данного взаимодействия представлены на рис. 3.

В результате анализа моделей распределения электронной плотности, высшей заселённой и низшей свободной молекулярных орбиталей установлено, что при взаимодействии наночастиц оксида железа с амилопектином происходит формирование орбиталей, а также электронной плотности между молекулами, что подтверждает возможность формирования химического взаимодействия между молекулами.

4. Заключение

В данной работе были получены наночастицы смешанного оксида железа способом химического осаждения в водной среде, в качестве железосодержащих прекурсоров использовались хлорид железа (III) и сульфат железа (II), в качестве стабилизатора – амилопектин. Изучены СЭМ-микрофотографии Fe_3O_4 , стабилизированного амилопектином. Установлено, что наночастицы обладают неправильной формой и размером менее 70 нм. Исследование образцов методом рентгеновской

дифракции показало, что образец смешанного оксида железа имеет кубическую гранецентрированную структуру. В результате компьютерного квантово-химического моделирования изучен процесс взаимодействия смешанного наноразмерного оксида железа с амилопектином. Установлено, что взаимодействие амилопектина с магнетитом является энергетически выгодным. Наиболее энергетически выгодна и химически стабильна модель взаимодействия через гидроксильную группу, присоединённую к C_2 первого *A*-связанного остатка глюкопиранозы.

В дальнейшем будет исследована агрегативная устойчивость наночастиц смешанного оксида железа, стабилизированного амилопектином, а также стабильность частиц в зависимости от активной кислотности среды и ионной силы.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 23-76-10046, <https://rscf.ru/en/project/23-76-10046/>.

Библиографический список:

1. **Nguyen, M.D.** Fe₃O₄ nanoparticles: Structures, synthesis, *magnetic* properties, surface functionalization, and emerging applications / M.D. Nguyen, H. Tran, S. Xu et al. // *Applied Sciences*. – 2021. – V. 11. – I. 23. – Art. № 11301. – 34 p. DOI: 10.3390/app112311301.
2. **Koo, K.N.** Preparation and characterization of superparamagnetic magnetite (Fe₃O₄) nanoparticles: A short review / K.N. Koo, A.F. Ismail, M.H. Dzarfan et al. // *Malaysian Journal of Fundamental and Applied Sciences*. – 2019. – V. 15. – № 1. – P. 23-31. DOI: 10.11113/mjfas.v15n2019.1224.
3. **Niculescu, A.G.**, Magnetite nanoparticles: synthesis methods – a comparative review / A.G. Niculescu, C. Chircov, A.M. Grumezescu // *Methods*. – 2022. – V. 199. – P. 16-27. DOI: 10.1016/j.ymeth.2021.04.018.
4. **Ganapathe, L.S.** Magnetite (Fe₃O₄) nanoparticles in biomedical application: From synthesis to surface functionalisation / L.S. Ganapathe, M.A. Mohamed, R. Mohamad Yunus et al // *Magnetochemistry*. – 2020. – V. 6. – I. 4. – Art. № 68. – 35 p. DOI: 10.3390/magnetochemistry6040068.
5. **Rajan, A.** Assessing magnetic and inductive thermal properties of various surfactants functionalised Fe₃O₄ nanoparticles for hyperthermia / A. Rajan, M. Sharma, N.K. Sahu // *Scientific Reports*. – 2020. – V. 10. – I. 1. – Art. № 15045. – 15 p. DOI: 10.1038/s41598-020-71703-6.
6. **Włodarczyk, A.** Magnetite nanoparticles in magnetic hyperthermia and cancer therapies: challenges and perspectives / A. Włodarczyk, S. Gorgoń, A. Radoń, K. Bajdak-Rusinek // *Nanomaterials*. – 2022. – V. 12. – I. 11. – Art. № 1807. – 23 p. DOI: 10.3390/nano12111807.
7. **Супрунчук, В.Е.** Оценка свойств нанокомпозита фукоидан/Fe₃O₄ как транспортного агента ковалентно связанного молекулярного груза / В.Е. Супрунчук // *Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов*. – 2023. – Вып. 15. – С. 1039-1048. DOI 10.26456/pcascnn/2023.15.1039.
8. **Alkhatib, R.** Physio-biochemical and ultrastructural impact of (Fe₃O₄) nanoparticles on tobacco / R. Alkhatib., B. Alkhatib, N.Abdo et al. // *BMC Plant Biology*. – 2019. – V. 19. – Art. № 253. – 12 p. DOI: 10.1186/s12870-019-1864-1.
9. **Plaksenkova, I.** Effects of Fe₃O₄ nanoparticle stress on the growth and development of Rocket Eruca sativa / I. Plaksenkova, M. Jermaļonoka, L. Bankovska et al. // *Journal of Nanomaterials*. – 2019. – V. 2019. – I. 1. – Art. № 2678247. – 10 p. DOI: 10.1155/2019/2678247.
10. **Feng, Y.** Effects of iron oxide nanoparticles (Fe₃O₄) on growth, photosynthesis, antioxidant activity and distribution of mineral elements in wheat (*Triticum aestivum*) Plants / Y. Feng, V.D. Kreslavski, A.N. Shmarev et al. // *Plants*. – 2022. – V. 11. – I. 14. – Art. № 1894. – 15 p. DOI: 10.3390/plants11141894.
11. **Kokina, I.** Impact of iron oxide nanoparticles on yellow medick (*Medicago falcata* L.) plants / I. Kokina, I. Plaksenkova, M. Jermaļonoka et al. // *Journal of Plant Interactions*. – 2020. – V. 15. – I. 1. – P. 1-7. DOI: 10.1080/17429145.2019.1708489.

12. **Yang, X.** Effects of iron oxide nanoparticles on the mineral composition and growth of soybean (*Glycine max* L.) plants / X. Yang, D. Alidoust, C. Wang // *Acta Physiologiae Plantarum*. – 2020. – V. 42. – I. 8. – Art. № 128. – 11 p. DOI: 10.1007/s11738-020-03104-1.
13. **Hieu, D.M.** Ferrite (Fe_3O_4) nanoparticle in soil stimulates the plant growth in peas and bok choy / D.M. Hieu, N.T. Hoa, H.T.M. Oanh et al. // *JST: Engineering and Technology for Sustainable Development*. – 2021. – V. 31. – I. 4. – P. 38-45. DOI: 10.51316/jst.153.etsd.2021.31.4.7.
14. **Rajput, V.D.** Impact of nanoparticles on soil resource / V.D. Rajput, T.M. Minkina, S.N. Sushkova et al. // In: *Nanomaterials for Soil Remediation*; ed by A. Amrane et al. – 2020. – Ch. 4. – P. 65-85. DOI: 10.1016/B978-0-12-822891-3.00004-9.
15. **Liu, J.** Fe_3O_4 nanoparticles as matrix solid-phase dispersion extraction adsorbents for the analysis of thirty pesticides in vegetables by ultrahigh-performance liquid chromatography-tandem mass spectrometry / J. Liu, C. Ji, X. Liu et al. // *Journal of Chromatography B*. – 2021. – V. 1165. – Art. № 122532. – 11 p. DOI: 10.1016/j.jchromb.2021.122532.
16. **Stolyar, S.V.** Polysaccharide-coated iron oxide nanoparticles: Synthesis, properties, surface modification / S.V. Stolyar, V.V. Krasitskaya, L.A. Frank et al. // *Materials Letters*. – 2021. – V. 284. – Part 1, – Art. № 128920. – 4 p. DOI: 10.1016/j.matlet.2020.128920.
17. **Samrot, A.V.** Utilization of gum polysaccharide of *Araucaria heterophylla* and *Azadirachta indica* for encapsulation of cyfluthrin loaded super paramagnetic iron oxide nanoparticles for mosquito larvicidal activity / A.V. Samrot, K.S. Bhavya, S.M. Roshini et al. // *International journal of biological macromolecules*. – 2020. – V. 153. – P. 1024-1034. DOI:10.1016/j.ijbiomac.2019.10.232.
18. **Mu, S.** Antioxidant activities and mechanisms of polysaccharides / S. Mu, W. Yang, G. Huang // *Chemical Biology & Drug Design*. – 2021. – V. 97. – I. 3. – P. 628-632. DOI: 10.1111/cbdd.13798.
19. **Yarley, O.P.N.** Reviews on mechanisms of in vitro antioxidant, antibacterial and anticancer activities of water-soluble plant polysaccharides / O.P.N. Yarley, A.B. Kojo, C. Zhou et al. // *International Journal of Biological Macromolecules*. – 2021. – V. 183. – P. 2262-2271. DOI: 10.1016/j.ijbiomac.2021.05.181.
20. **Rachidi, F.** Microalgae polysaccharides bio-stimulating effect on tomato plants: Growth and metabolic distribution / F. Rachidi, R. Benhima, L. Sbabou et al. // *Biotechnology reports*. – 2020. – V. 25. – Art. № e00426 – 8 p. DOI: 10.1016/j.btre.2020.e00426.
21. **Goudenhooff, C.** Flax (*Linum usitatissimum* L.) fibers for composite reinforcement: Exploring the link between plant growth, cell walls development, and fiber properties / C. Goudenhooff, A. Bourmaud, C. Baley // *Frontiers in Plant Science*. – 2019 – V. 10. – Art. № 411. – 23 p. DOI: 10.3389/fpls.2019.00411.
22. **Haas, K.T.** The role of pectin phase separation in plant cell wall assembly and growth / K.T. Haas, R. Wightman, A. Peaucelle et al. // *The Cell Surface*. – 2021. – V. 7. – Art. № 100054. – 11 p. DOI: 10.1016/j.tcs.2021.100054.
23. **Ciriminna, R.** Pectin: new science and forthcoming applications of the most valued hydrocolloid / R. Ciriminna, A. Fidalgo, A. Scurria et al. // *Food Hydrocolloids*. – 2022. – V. 127. – Art. № 107483. – 8 p. DOI: 10.1016/j.foodhyd.2022.107483.
24. Q-Chem 6.1 User's Manual. – Режим доступа: <https://manual.q-chem.com/latest/>. – 12.07.2024.
25. IQmol Molecular Viewer. – Режим доступа: <http://www.iqmol.org/>. – 12.07.2024.

References:

1. Nguyen M.D., Tran H., Xu S. et al. Fe_3O_4 nanoparticles: Structures, synthesis, *magnetic* properties, surface functionalization, and emerging applications, *Applied Sciences*, 2021, vol. 11, issue 23, art. № 11301, 34 p. DOI: 10.3390/app112311301.
2. Koo K.N., Ismail A.F., Dzarfan M.H. et al. Preparation and characterization of superparamagnetic magnetite (Fe_3O_4) nanoparticles: A short review, *Malaysian Journal of Fundamental and Applied Sciences*, 2019, vol. 15, no. 1, pp. 23-31. DOI: 10.11113/mjfas.v15n2019.1224.
3. Niculescu A.G., Chircov C., Grumezescu A.M. Magnetite nanoparticles: synthesis methods – a comparative review, *Methods*, 2022, vol. 199, pp. 16-27. DOI: 10.1016/j.ymeth.2021.04.018.
4. Ganapathe L.S., Mohamed M.A., Mohamad Yunus R. et al. Magnetite (Fe_3O_4) nanoparticles in biomedical application: From synthesis to surface functionalisation, *Magnetochemistry*, 2020, vol. 6, art. № 68, 35 p. DOI: 10.3390/magnetochemistry6040068.
5. Rajan A., Sharma M., Sahu N.K. Assessing magnetic and inductive thermal properties of various surfactants functionalised Fe_3O_4 nanoparticles for hyperthermia, *Scientific Reports*, 2020, vol. 10. issue 1, art. № 15045, 15 p. DOI: 10.1038/s41598-020-71703-6.
6. Włodarczyk A., Gorgoń S., Radoń A., Bajdak-Rusinek K. Magnetite nanoparticles in magnetic hyperthermia and cancer therapies: Challenges and Perspectives, *Nanomaterials*, 2022, vol. 12, issue 11, art. № 1807, 23 p.

DOI: 10.3390/nano12111807.

7. Suprunchuk V.E. Otsenka svojstv nanokompozita fukoidan/ Fe_3O_4 kak transportnogo agenta kovalentno svyazannogo molekulyarnogo gruzha [Evaluation of the properties of the fucoidan/ Fe_3O_4 nanocomposite as a transport agent of covalently bound molecular cargo], *Fiziko-khimicheskie aspekty izucheniya klasterov, nanostruktur i nanomaterialov* [Physical and chemical aspects of the study of clusters, nanostructures and nanomaterials], 2023, issue 15, pp. 1039-1048. DOI: 10.26456/pcascnn/2023.15.1039. (In Russian)
8. Alkhatib R., Alkhatib B., Abdo N. et al. Physio-biochemical and ultrastructural impact of (Fe_3O_4) nanoparticles on tobacco, *BMC Plant Biology*, 2019, vol. 19, art. no. 253, 12 p. DOI: 10.1186/s12870-019-1864-1.
9. Plaksenkova I., Jermajonoka M., Bankovska L. et al. Effects of Fe_3O_4 nanoparticle stress on the growth and development of Rocket Eruca sativa, *Journal of Nanomaterials*, 2019, vol. 2019, issue 1, art. № 2678247, 10 p. DOI: 10.1155/2019/2678247.
10. Feng Y., Kreslavski V.D., Shmarev A.N. et al. Effects of iron oxide nanoparticles (Fe_3O_4) on growth, photosynthesis, antioxidant activity and distribution of mineral elements in wheat (*Triticum aestivum*) plants, *Plants*, 2022, vol. 11, issue 14, art. № 1894, 15 p. DOI: 10.3390/plants11141894.
11. Kokina I., Plaksenkova I., Jermajonoka M. et al. Impact of iron oxide nanoparticles on yellow medick (*Medicago falcata* L.) plants, *Journal of Plant Interactions*, 2020, vol. 15, issue 1, pp. 1-7. DOI: 10.1080/17429145.2019.1708489.
12. Yang X., Alidoust D., Wang C. Effects of iron oxide nanoparticles on the mineral composition and growth of soybean (*Glycine max* L.) plants, *Acta Physiologiae Plantarum*, 2020, vol. 42, issue 8, art. no. 128, 11 p. DOI: 10.1007/s11738-020-03104-1.
13. hieu d.m., hoa n.t., oanh h.t.m. et al. ferrite (Fe_3O_4) nanoparticle in soil stimulates the plant growth in peas and bok choy, *JST: Engineering and Technology for Sustainable Development*, 2021, vol. 31, issue 4, pp. 38-45. DOI: 10.51316/jst.153.etsd.2021.31.4.7.
14. Rajput V.D., Minkina T.M., Sushkova S.N. et al. Impact of nanoparticles on soil resource, *Nanomaterials for Soil Remediation*, ed by A. Amrane et al., 2020, chapter 4, pp. 65-85. DOI: 10.1016/B978-0-12-822891-3.00004-9.
15. Liu J., Ji C., Liu X. et al. Fe_3O_4 nanoparticles as matrix solid-phase dispersion extraction adsorbents for the analysis of thirty pesticides in vegetables by ultrahigh-performance liquid chromatography-tandem mass spectrometry, *Journal of Chromatography B*, 2021, vol. 1165, art. № 122532, 11 p. DOI: 10.1016/j.jchromb.2021.122532.
16. Stolyar S.V., Krasitskaya V.V., Frank L.A. et al. Polysaccharide-coated iron oxide nanoparticles: Synthesis, properties, surface modification, *Materials Letters*, 2021, vol. 284, part 1, art. № 128920, 4 p. DOI: 10.1016/j.matlet.2020.128920.
17. Samrot A.V., Bhavya K.S., Roshini S.M. et al. Utilization of gum polysaccharide of *Araucaria heterophylla* and *Azadirachta indica* for encapsulation of cyfluthrin loaded super paramagnetic iron oxide nanoparticles for mosquito larvicidal activity, *International journal of biological macromolecules*, 2020, vol. 153, pp. 1024-1034. DOI: 10.1016/j.ijbiomac.2019.10.232.
18. Mu S., W. Yang W., Huang G. Antioxidant activities and mechanisms of polysaccharides, *Chemical Biology & Drug Design*, 2021, vol. 97, issue 3, pp. 628-632. DOI: 10.1111/cbdd.13798.
19. Yarley O.P.N., Kojo A.B., Zhou C. et al. Reviews on mechanisms of in vitro antioxidant, antibacterial and anticancer activities of water-soluble plant polysaccharides, *International Journal of Biological Macromolecules*, 2021, vol. 183, pp. 2262-2271. DOI: 10.1016/j.ijbiomac.2021.05.181.
20. Rachidi F., Benhima R., Sbabou L. et al. Microalgae polysaccharides bio-stimulating effect on tomato plants: Growth and metabolic distribution, *Biotechnology reports*, 2020, vol. 25, art. № e00426, 8 p. DOI: 10.1016/j.btre.2020.e00426.
21. Goudenhoof C., Bourmaud A., Baley C. Flax (*Linum usitatissimum* L.) fibers for composite reinforcement: Exploring the link between plant growth, cell walls development, and fiber properties, *Frontiers in Plant Science*, 2019, vol. 10, art. № 411, 23 p. DOI: 10.3389/fpls.2019.00411.
22. Haas K.T., Wightman R., Peaucelle A. et al. The role of pectin phase separation in plant cell wall assembly and growth, *The Cell Surface*, 2021, vol. 7, art. № 100054, 11 p. DOI: 10.1016/j.tcs.2021.100054.
23. Ciriminna R., Fidalgo A., Scurria A. et al. Pectin: New science and forthcoming applications of the most valued hydrocolloid, *Food Hydrocolloids*, 2022, vol. 127, art. № 107483, 8 p. DOI: 10.1016/j.foodhyd.2022.107483.
24. Q-Chem 6.1 User's Manual. Available at: <https://manual.q-chem.com/latest/> (accessed 12.07.2024).
25. IQmol Molecular Viewer. Available at: <http://www.url: http://www.iqmol.org/> (accessed 12.07.2024).

Investigation of the process of polymer stabilization of mixed iron oxide with amylopectin

A.A. Nagdalian, P.S. Leontiev, A.B. Golik, A.S. Askerova, A.M. Serov, A.V. Tatov

North-Caucasian Federal University, Stavropol, Russian Federation

DOI: 10.26456/pcascnn/2024.16.951

Abstract: In this work, samples of mixed nanoscale iron oxide stabilized with amylopectin were obtained by chemical precipitation in an aqueous medium. This compound has a wide range of applications in biomedical technologies, energy storage and conversion devices due to its supermagnetic properties. The microstructure was studied by scanning electron microscopy and the phase composition by diffractometric method, as well as by computer quantum chemical modeling of the interaction of amylopectin and mixed nanoscale iron oxide. During the study of the phase composition, it was found that the sample is a mixed iron oxide Fe_3O_4 with a cubic face-centered lattice and a spatial group Fd3m. Based on the analysis of the microstructure, it was found that the sample is formed from particles with a diameter of 24 to 54 nm. As a result of computer quantum chemical modeling, it was found that the interaction of iron oxide nanoparticles with amylopectin is energetically advantageous and chemically stable. The most likely interaction is through a hydroxyl group attached to the C₂ first A-bound glucopyranose residue, since optimal values of total energy ($E = -3839.330$ kcal/mol) and chemical hardness ($\eta = 0.159$ eV) are observed during this interaction.

Keywords: *nanoparticles, co-deposition method, iron (III) oxide, scanning electron microscopy, stabilizer.*

Нагдалян Андрей Ашотович – к.т.н., старший научный сотрудник научно-исследовательской лаборатории пищевой и промышленной биотехнологии, факультет пищевой инженерии и биотехнологий им. академика А.Г. Храмцова, ФГАОУ ВО «Северо-Кавказский федеральный университет»

Леонтьев Павел Сергеевич – студент 3 курса кафедры физики и технологии наноструктур и материалов, физико-технический факультет, ФГАОУ ВО «Северо-Кавказский федеральный университет»

Голук Алексей Борисович – ассистент кафедры физики и технологии наноструктур и материалов, физико-технический факультет, ФГАОУ ВО «Северо-Кавказский федеральный университет»

Аскерова Алина Салмановна – студентка 2 курса кафедры физики и технологии наноструктур и материалов физико-технического факультета ФГАОУ ВО «Северо-Кавказский федеральный университет»

Серов Александр Михайлович – студент 1 курса кафедры физики и технологии наноструктур и материалов, физико-технический факультет, ФГАОУ ВО «Северо-Кавказский федеральный университет»

Татов Алексей Владимирович – студент 1 курса кафедры физики и технологии наноструктур и материалов, физико-технический факультет, ФГАОУ ВО «Северо-Кавказский федеральный университет»

Andrey A. Nagdalian – Ph. D., Senior Researcher, Research Laboratory of Food and Industrial Biotechnology, Faculty of Food Engineering and Biotechnology named after Academician A.G. Khrantsov, North Caucasus Federal University

Pavel S. Leontiev – 3rd year student, Department of Physics and Technology of Nanostructures and Materials, Faculty of Physics and Technology, North Caucasus Federal University

Alexey B. Golik – Assistant, Department of Physics and Technology of Nanostructures and Materials, Faculty of Physics and Technology, North Caucasus Federal University

Alina S. Askerova – 2nd year student, Department of Physics and Technology of Nanostructures and Materials, Faculty of Physics and Technology, North Caucasus Federal University

Alexander M. Serov – 1st year student, Department of Physics and Technology of Nanostructures and Materials, Faculty of Physics and Technology, North Caucasus Federal University

Alexey V. Tatov – 1st year student, Department of Physics and Technology of Nanostructures and Materials, Faculty of Physics and Technology, North Caucasus Federal University

Поступила в редакцию/received: 19.08.2024; после рецензирования/revised: 15.09.2024; принята/accepted 20.09.2024.