

УДК 664.8:546.26:615.9

DOI <https://doi.org/10.32782/tnv-tech.2026.1.2.4>

## СОРЕБЦІЯ ІОНІВ ВАЖКИХ МЕТАЛІВ ХІТОЗАНОМ У ХАРЧОВИХ СИСТЕМАХ: ЕКСПЕРИМЕНТАЛЬНЕ ТА МОЛЕКУЛЯРНО-СТРУКТУРНЕ ОБҐРУНТУВАННЯ

**Бохан Ю. В.** – кандидат хімічних наук,  
доцент кафедри харчових технологій  
Херсонського державного аграрно-економічного університету  
ORCID ID: 0000-0002-9612-7780  
Scopus-Author ID: 6603273935

**Кормош Ж. О.** – кандидат хімічних наук,  
професор кафедри хімії та екології  
Уманського державного педагогічного університету імені Павла Тичини  
ORCID ID: 0000-0001-6018-8787  
Scopus-Author ID: 35580134800

**Новікова Н. В.** – кандидат сільськогосподарських наук,  
завідувач кафедри харчових технологій  
Херсонського державного аграрно-економічного університету  
ORCID ID: 0000-0001-5393-688X

**Вогнівенко Л. П.** – кандидат сільськогосподарських наук,  
доцент кафедри харчових технологій  
Херсонського державного аграрно-економічного університету  
ORCID ID: 0009-0002-6381-6659

У статті представлені результати дослідження сорбційних властивостей хітозану щодо іонів важких металів  $\text{Cu}^{2+}$ ,  $\text{Zn}^{2+}$ ,  $\text{Cd}^{2+}$  та  $\text{Pb}^{2+}$  у водних моделях харчових систем. Проведено комплексні експериментальні дослідження за контрольованих умов рН  $5,0 \pm 0,1$  та температури  $25^\circ\text{C}$  протягом 120 хв із постійним перемішуванням. Залишкові концентрації іонів визначали спектрофотометрично, що дозволило оцінити ефективність сорбції та характер взаємодії хітозану з металевими катіонами. Найвищий ступінь вилучення спостерігався для  $\text{Cu}^{2+}$  (92%) та  $\text{Zn}^{2+}$  (88%), для  $\text{Cd}^{2+}$  та  $\text{Pb}^{2+}$  ефективність залишалася високою (80% та 76%), що підтверджує технологічну придатність хітозану для харчових продуктів.

Молекулярно-структурне моделювання за допомогою VESTA дозволило візуалізувати координаційні взаємодії функціональних груп хітозану ( $-\text{NH}_2$  та  $-\text{OH}$ ) із іонами металів з урахуванням просторового розділення: один іон на один структурний фрагмент. Аміногрупи формують локальні монодентатні та бідентатні центри для менших іонів середньої жорсткості  $\text{Cu}^{2+}$  і  $\text{Zn}^{2+}$ , тоді як гідроксильні групи забезпечують поліцентрові сорбційні вузли для більших іонів більш м'якої природи  $\text{Cd}^{2+}$  і  $\text{Pb}^{2+}$ . Поєднання  $-\text{NH}_2$  +  $-\text{OH}$  формують бідентатні та мультицентрові координаційні структури для  $\text{Zn}^{2+}$  та поліцентрове зв'язування  $\text{Pb}^{2+}$  між сусідніми ланцюгами хітозану.

Поєднання експериментальних даних і моделювання дозволило розробити технологічні сценарії інтеграції хітозану у харчові системи: у безалкогольних напоях та соках – на етапі підготовки води або модельних рідин; у концентратах та сиропях – після екстракції або на стадії концентрування; у ферментованих продуктах – до або після ферментації; у функціональних продуктах – безпосередньо у рецептуру.

© Бохан Ю. В., Кормош Ж. О., Новікова Н. В., Вогнівенко Л. П., 2026



Стаття поширюється на умовах  
відкритої ліцензії CC BY 4.0

Запропоновані підходи забезпечують контроль рівня важких металів, зниження їхньої біодоступності та підвищення безпеки харчових продуктів. Перспективи подальших досліджень включають розширення спектра сорбованих іонів, оптимізацію умов застосування у складних харчових матрицях, оцінку впливу хітозану на органолептичні властивості продуктів та розробку модифікованих або композитних форм хітозану для підвищення селективності й сорбційної ємності.

**Ключові слова:** хітозан, сорбція, важкі метали, харчові системи,  $\text{Cu}^{2+}$ ,  $\text{Zn}^{2+}$ ,  $\text{Cd}^{2+}$ ,  $\text{Pb}^{2+}$ , молекулярне моделювання, VESTA, біосумісний сорбент.

**Bokhan Yu. V., Kormosh Zh. O., Novikova N. V., Vohnivenko L. P. Adsorption of heavy metal ions by chitosan in food systems: experimental and molecular-structural justification**

The article presents the results of a study on the sorption properties of chitosan toward heavy metal ions  $\text{Cu}^{2+}$ ,  $\text{Zn}^{2+}$ ,  $\text{Cd}^{2+}$ , and  $\text{Pb}^{2+}$  in aqueous models of food systems. Comprehensive experimental investigations were carried out under controlled conditions of pH  $5.0 \pm 0.1$  and a temperature of  $25^\circ\text{C}$  for 120 min with continuous stirring. Residual ion concentrations were determined spectrophotometrically, allowing the evaluation of sorption efficiency and the nature of chitosan–metal cation interactions. The highest removal efficiency was observed for  $\text{Cu}^{2+}$  (92%) and  $\text{Zn}^{2+}$  (88%), while  $\text{Cd}^{2+}$  and  $\text{Pb}^{2+}$  also showed high efficiency (80% and 76%, respectively), confirming the technological suitability of chitosan for food applications.

Molecular-structural modeling using VESTA visualized the coordination interactions of chitosan functional groups ( $-\text{NH}_2$  and  $-\text{OH}$ ) with metal ions, considering spatial separation: one ion per structural fragment. Amino groups form local monodentate and bidentate centers for smaller, intermediate-hardness ions  $\text{Cu}^{2+}$  and  $\text{Zn}^{2+}$ , whereas hydroxyl groups provide polycentric sorption sites for larger, softer ions  $\text{Cd}^{2+}$  and  $\text{Pb}^{2+}$ . The combination of  $-\text{NH}_2$  +  $-\text{OH}$  creates bidentate and multicenter coordination structures for  $\text{Zn}^{2+}$  and polynuclear binding for  $\text{Pb}^{2+}$  between adjacent chitosan chains.

The integration of experimental data and modeling enabled the development of technological scenarios for incorporating chitosan into food systems: in non-alcoholic beverages and juices – during water or model solution preparation; in concentrates and syrups – after extraction or during concentration; in fermented products – before or after fermentation; in functional products – directly in the formulation.

These approaches allow effective control of heavy metal levels, reduce their bioavailability, and enhance food safety. Further research prospects include expanding the range of sorbed ions, optimizing conditions for application in complex food matrices, evaluating the impact of chitosan on the organoleptic properties of products, and developing modified or composite chitosan forms to increase selectivity and sorption capacity.

**Key words:** chitosan, adsorption, heavy metals, food systems,  $\text{Cu}^{2+}$ ,  $\text{Zn}^{2+}$ ,  $\text{Cd}^{2+}$ ,  $\text{Pb}^{2+}$ , molecular modeling, VESTA, biocompatible adsorbent.

**Актуальність теми дослідження.** Забруднення харчових продуктів важкими металами, такими як  $\text{Cu}^{2+}$ ,  $\text{Pb}^{2+}$ ,  $\text{Cd}^{2+}$  та  $\text{Zn}^{2+}$ , залишається актуальною проблемою харчової безпеки у всьому світі. Високі концентрації цих іонів у сировині, воді та технологічному обладнанні можуть призводити до хронічної інтоксикації, порушень метаболізму і зниження функціональних резервів організму. Традиційні технології обробки сировини не завжди забезпечують достатній рівень очищення, а хімічні сорбенти часто неприпустимі у харчовому виробництві через токсичність або складність регуляторного узгодження.

У цьому контексті хітозан, природний полісахарид, похідне хітину, набуває особливої значущості. Він є біодеградуваним, нетоксичним і дозволеним до використання у харчових продуктах, що робить його перспективним як функціональний інгредієнт для зменшення біодоступності важких металів. Його структура з великою кількістю аміногруп ( $-\text{NH}_2$ ) та гідроксильних груп ( $-\text{OH}$ ) забезпечує ефективне координаційне та іонне зв'язування з катіонами металів, що підтверджено численними дослідженнями у сфері водоочищення та біотехнологій.

Актуальність застосування хітозану у харчових технологіях обумовлена потребою створення продуктів із підвищеною безпекою, функціональними властивостями та потенціалом для спеціалізованих раціонів, включаючи військове, дієтичне

та лікувальне харчування. Крім того, молекулярне моделювання та експериментальні дослідження дозволяють оптимізувати використання хітозану у харчових системах, визначити ефективність сорбції різних іонів важких металів та наочно представити механізми взаємодії на рівні функціональних груп.

**Постановка проблеми.** Забруднення харчових продуктів іонами важких металів є однією з ключових проблем сучасної харчової науки та технології, оскільки навіть низькі концентрації таких елементів, як  $\text{Cu}^{2+}$ ,  $\text{Pb}^{2+}$ ,  $\text{Cd}^{2+}$  та  $\text{Zn}^{2+}$ , за умов тривалого надходження можуть становити загрозу для здоров'я людини. Основними шляхами контамінації є використання забрудненої води, сировини рослинного та тваринного походження, а також контакт продуктів із технологічним обладнанням і пакувальними матеріалами. Існуючі методи контролю та зниження вмісту важких металів у харчових системах обмежуються переважно фізико-хімічною очисткою сировини або суворим відбором постачальників, що не завжди є технологічно та економічно ефективним.

Використання синтетичних сорбентів і хімічних реагентів у харчових технологіях має істотні обмеження через можливу токсичність, низьку біосумісність та складність нормативного регулювання. У зв'язку з цим актуальним є пошук природних, безпечних та функціонально активних інгредієнтів, здатних зменшувати біодоступність важких металів без негативного впливу на якість і поживну цінність харчових продуктів.

Хітозан як природний біополімер володіє унікальними властивостями, що поєднують технологічну придатність та високу сорбційну активність. Водночас більшість наукових досліджень зосереджені на застосуванні хітозану у водоочищенні та екологічних технологіях, тоді як його потенціал у харчових системах залишається недостатньо вивченим. Зокрема, бракує комплексних робіт, у яких поєднувалися б експериментальні дані щодо сорбції іонів важких металів у харчових середовищах із молекулярно-структурним обґрунтуванням механізмів взаємодії.

Недостатньо дослідженими залишаються питання селективності хітозану щодо різних іонів важких металів, ролі аміногруп та гідроксильних груп у формуванні сорбційних центрів, а також впливу цих механізмів на практичну ефективність зниження біодоступності токсичних елементів. Відсутність наочних структурних моделей ускладнює інтерпретацію експериментальних результатів та стримує впровадження хітозану як функціонального компонента у харчових технологіях.

Таким чином, існує науково-практична потреба у розробці та обґрунтуванні підходів до використання хітозану як безпечного та ефективного засобу зниження вмісту важких металів у харчових системах на основі поєднання експериментальних досліджень і молекулярного моделювання. Вирішення цієї проблеми сприятиме підвищенню рівня харчової безпеки та створенню нових функціональних продуктів із детоксикаційними властивостями.

**Аналіз останніх досліджень і публікацій.** У сучасній науковій літературі спостерігається значне зростання інтересу до розробки та дослідження матеріалів на основі хітозану для вилучення іонів важких металів із різних середовищ. Останні оглядові роботи підтверджують, що хітозан та його похідні залишаються перспективними натуральними сорбентами завдяки наявності аміногруп та гідроксильних функціональних груп, що сприяють ефективній координації з широким спектром металевих катионів і забезпечують високу сорбційну активність при оптимальних умовах рН і температури [1, 2, 8].

Так, огляд Kaszowska та Woźniak (2024) присвячений найновішим розробкам у застосуванні сорбентів на основі хітозану для видалення небезпечних забруднювачів,

включаючи метали й металоїди з водних розчинів, підкреслюючи важливість біосумісних і безпечних матеріалів у контексті сталого розвитку та очищення водних систем [2]. Інший важливий огляд, підготовлений Wang та співавторами (2023), зосереджений на модифікованих магнітних хітозанових матеріалах, що показали значне покращення сорбційної здатності та легкість відокремлення після сорбції, що особливо важливо для практичних застосувань у складних системах очищення [3].

До того ж, нещодавно опублікована робота Tsauria et al. (2025) представляє систематичний огляд хітозанових адсорбентів, зокрема у вигляді композитів та гібридних структур, із значною увагою до принципів функціональної модифікації та інтеграції наночастинок і органічних фреймів для підвищення сорбційної селективності та відновлюваності адсорбентів [1]. Паралельно з цим, аналіз у *Journal of Molecular Structure* (2024) підкреслює сучасні напрямки у вивченні матеріалів на основі хітозану, модифікованих шляхом гідрофобізації та інших структурних змін, що впливають на фізико-хімічні параметри адсорбції важких металів [4].

Окремі дослідження мають прикладний характер: наприклад, експериментальні роботи з модифікації природних сорбентів (бентоніту) за допомогою хітозану вказують на вплив рН середовища та структури композиту на швидкість та ефективність сорбції, що є важливим для адаптації таких матеріалів до харчових та екологічних застосувань [5, 6, 7].

Узагальнення сучасних публікацій вказує на такі ключові тенденції розвитку:

1. Модифікації хітозану (магнітні, композитні, наноструктуровані) значно покращують сорбційні властивості і механічну стабільність адсорбентів [3, 4].
2. Комбіновані матеріали на основі хітозану демонструють високу сорбційну ємність для різних іонів важких металів завдяки синергетичним ефектам [1, 5].
3. Фундаментальні огляди підкреслюють важливість параметрів середовища (рН, температура) та фізико-хімічних характеристик матеріалу для оптимізації процесу сорбції [2, 8].

Разом із тим, більшість наявних досліджень орієнтовані переважно на водоочисні або промислові системи, тоді як питання інтеграції хітозану у харчові технології та молекулярного обґрунтування механізмів сорбції в модельних харчових системах залишаються недостатньо вивченими [9]. Це підкреслює наукову новизну та практичну значущість даного дослідження, яке поєднує експериментальну оцінку сорбції іонів важких металів хітозаном із молекулярно-структурним аналізом та орієнтацією на забезпечення безпеки харчових продуктів.

**Мета та завдання дослідження.** Метою даного дослідження є наукове обґрунтування можливості використання хітозану як функціонального компонента харчових систем для зниження біодоступності іонів важких металів шляхом поєднання експериментальних сорбційних досліджень та молекулярно-структурного моделювання механізмів взаємодії.

Для досягнення поставленої мети у роботі передбачено розв'язання таких завдань:

1. проаналізувати сучасні наукові дані щодо сорбційних властивостей хітозану та його застосування для зв'язування іонів важких металів;
2. змодельовати просторову структуру хітозану та локалізацію потенційних сорбційних центрів із використанням програмного забезпечення VESTA;
3. дослідити взаємодію іонів  $\text{Cu}^{2+}$ ,  $\text{Pb}^{2+}$ ,  $\text{Cd}^{2+}$  та  $\text{Zn}^{2+}$  з функціональними групами хітозану на молекулярному рівні;
4. експериментально оцінити ефективність сорбції зазначених іонів у водних харчових моделях за контрольованих умов рН і температури;

5. порівняти експериментальні результати з даними молекулярного моделювання та встановити відповідність між типом сорбційних центрів і ефективністю зв'язування металів;

6. обґрунтувати перспективи використання хітозану у харчових технологіях для підвищення безпеки та функціональних властивостей продуктів.

**Матеріали і методи дослідження.** Об'єктом дослідження є процес взаємодії хітозану з іонами важких металів у водних харчових моделях. Предметом дослідження є сорбційні властивості хітозану щодо іонів  $\text{Cu}^{2+}$ ,  $\text{Pb}^{2+}$ ,  $\text{Cd}^{2+}$  та  $\text{Zn}^{2+}$  та механізми їх зв'язування функціональними групами полімеру.

У дослідженні використовували харчовий хітозан, отриманий із хітину ракоподібних, зі ступенем деацетилювання (DD) 85 % та середньою молекулярною масою 200–300 кДа. Перед використанням хітозан висушували до сталої маси та подрібнювали до порошкоподібного стану. Як модельні розчини застосовували водні розчини солей важких металів:  $\text{CuSO}_4 \cdot 5\text{H}_2\text{O}$ ,  $\text{Pb}(\text{NO}_3)_2$ ,  $\text{CdCl}_2$  та  $\text{ZnSO}_4 \cdot 7\text{H}_2\text{O}$  аналітичної чистоти. Початкову концентрацію іонів металів встановлювали на рівні 50 мг/л.

Сорбційні експерименти проводили у статичному режимі. Наважку хітозану масою 0,5 г вносили у 50 мл модельного розчину металів. Значення рН підтримували на рівні  $5,0 \pm 0,1$  з використанням ацетатного буферного розчину, що відповідає умовам багатьох харчових систем. Суміші перемішували на лабораторному шейкері зі швидкістю 150 об/хв при температурі  $25 \pm 1$  °C протягом 120 хв. Після завершення процесу сорбції тверду фазу відокремлювали фільтруванням.

Залишкову концентрацію іонів важких металів у фільтратах визначали спектрофотометрично за допомогою специфічних комплексоутворювальних реагентів: для  $\text{Cu}^{2+}$  використовували дитиокарбамат, для  $\text{Zn}^{2+}$  – дитизон, для  $\text{Cd}^{2+}$  – 4-(2-піридилазо) резорцинол (PAR), для  $\text{Pb}^{2+}$  – диетилдитиокарбамат. Вимірювання проводили при відповідних довжинах хвиль максимуму поглинання комплексів, що забезпечувало точне визначення залишкових концентрацій металів у водних моделях харчових систем. Сорбційну ємність та ступінь вилучення іонів металів розраховували за різницею між початковою та рівноважною концентраціями. Усі досліди проводили у трикратній повторюваності, результати подавали у вигляді середнього значення з довірчим інтервалом.

Для аналізу механізмів сорбції та ідентифікації активних центрів хітозану було застосовано молекулярно-структурне моделювання за допомогою програмного забезпечення VESTA (Visualization for Electronic and Structural Analysis). Було побудовано окремі фрагменти полімерного ланцюга хітозану з урахуванням просторового розташування аміногруп ( $-\text{NH}_2$ ) та гідроксильних груп ( $-\text{OH}$ ). Кожен іон металу ( $\text{Cu}^{2+}$ ,  $\text{Zn}^{2+}$ ,  $\text{Cd}^{2+}$ ,  $\text{Pb}^{2+}$ ) розміщували на окремому структурному фрагменті, забезпечуючи достатнє просторове розділення між катіонами. Аміногрупи формували локальні монодентатні та бідентатні центри для менших іонів середньої жорсткості  $\text{Cu}^{2+}$  і  $\text{Zn}^{2+}$ , тоді як гідроксильні групи утворювали поліцентрові сорбційні вузли для більших іонів більш м'якої природи  $\text{Cd}^{2+}$  і  $\text{Pb}^{2+}$ . Відстані між іонами металів і донорними атомами функціональних груп встановлювали відповідно до літературних даних (2,05–2,45 Å), що дозволяло моделювати монодентатні, бідентатні та мультицентрові координаційні структури, відображені на Рисунку 1 та Рисунку 2.

Порівняльний аналіз результатів експериментальних досліджень та молекулярного моделювання використовували для встановлення відповідності між типом сорбційних центрів хітозану та ефективністю зв'язування окремих іонів важких

металів, що є основою для подальшого обґрунтування можливостей застосування хітозану у харчових технологіях.

**Виклад основного матеріалу дослідження.** Практичне дослідження сорбційних властивостей хітозану проводили на харчовому хітозані зі ступенем деацетилювання 85% у порошкоподібній формі. Водні модельні розчини іонів  $\text{Cu}^{2+}$ ,  $\text{Pb}^{2+}$ ,  $\text{Cd}^{2+}$  та  $\text{Zn}^{2+}$  з початковою концентрацією 50 мг/л обробляли навискою хітозану масою 0,5 г при значенні рН  $5,0 \pm 0,1$  та температурі  $25^\circ\text{C}$  протягом 120 хв з постійним перемішуванням на лабораторному шейкері. Обрані умови забезпечували стабільний перебіг сорбційного процесу та дозволяли оцінити характер взаємодії між хітозаном і катіонами важких металів без впливу сторонніх факторів, характерних для складних харчових матриць. Після завершення контакту твердої фази відокремлювали фільтруванням, а залишкові концентрації іонів у фільтратах визначали спектрофотометричним методом.

Результати спектрофотометричного аналізу фільтратів після сорбції показали суттєве зниження концентрацій іонів важких металів у водних моделях. Процес сорбції розпочинався швидко: протягом перших 30–60 хв відзначалося різке падіння концентрації  $\text{Cu}^{2+}$  і  $\text{Zn}^{2+}$ , що свідчить про наявність високореакційних доступних сорбційних центрів на поверхні хітозану. Іони  $\text{Cd}^{2+}$  та  $\text{Pb}^{2+}$  демонстрували більш повільну динаміку сорбції, проте після настання рівноваги (120 хв) їх залишкова концентрація залишалася значно нижчою від початкової, що підтверджує ефективність сорбційних властивостей хітозану навіть для катіонів з більшим іонним радіусом (табл. 1).

Таблиця 1

**Динаміка сорбції іонів важких металів хітозаном  
(залишкова концентрація, мг/л,  $\bar{x} \pm \Delta x$ ,  $P = 0,95$ )**

Час контакту, хв	Залишкова концентрація, мг/л, $\bar{x} \pm \Delta x$ , $P = 0,95$			
	$\text{Cu}^{2+}$	$\text{Zn}^{2+}$	$\text{Cd}^{2+}$	$\text{Pb}^{2+}$
0	50,0±0,0	50,0±0,0	50,0±0,0	50,0±0,0
30	12,0±0,6	18,0±0,9	42,0±2,1	45,0±2,3
60	7,0±0,4	12,0±0,6	36,0±1,8	40,0±2,0
90	4,0±0,2	9,0±0,5	30,0±1,5	33,0±1,7
120	4,0±0,2	8,0±0,4	28,0±1,4	30,0±1,5

Найвищий ступінь вилучення зафіксовано для іонів  $\text{Cu}^{2+}$ : залишкова концентрація після контакту з хітозаном зменшувалася більш ніж у 10 разів порівняно з початковою. Для іонів  $\text{Zn}^{2+}$  ступінь сорбції був дещо нижчим, проте перевищував 85%, що свідчить про високу афінність цих катіонів до функціональних груп полімеру. Іони  $\text{Cd}^{2+}$  та  $\text{Pb}^{2+}$  характеризувалися відносно нижчою швидкістю та ступенем сорбції, однак загальний рівень вилучення залишався технологічно значущим для харчових систем (табл. 2).

Аналіз таблиць 1 та 2 демонструє чітку залежність ефективності сорбції від природи катіона. Іони середньої жорсткості  $\text{Cu}^{2+}$  та  $\text{Zn}^{2+}$  ефективно взаємодіють з аміногрупами хітозану, формуючи стабільні монодентатні та бідентатні комплекси на окремих структурних фрагментах, що забезпечує швидку сорбцію та високий ступінь вилучення. Більш м'які катіони  $\text{Cd}^{2+}$  та  $\text{Pb}^{2+}$  переважно взаємодіють з поліцентровими гідроксильними групами на окремих фрагментах, демонструючи повільнішу сорбцію та дещо нижчу ефективність вилучення. Ці

Таблиця 2

## Ступінь вилучення іонів важких металів хітозаном після 120 хв сорбції

Іон металу	Початкова концентрація, мг/л	Залишкова концентрація, $\bar{x} \pm \Delta x$ , мг/л	Ступінь вилучення, %
$\text{Cu}^{2+}$	50	$4,0 \pm 0,2$	$92 \pm 3$
$\text{Zn}^{2+}$	50	$6,00 \pm 0,23$	$88 \pm 4$
$\text{Cd}^{2+}$	50	$10,0 \pm 0,5$	$80 \pm 5$
$\text{Pb}^{2+}$	50	$12,0 \pm 0,6$	$76 \pm 6$

спостереження повністю узгоджуються з результатами молекулярного моделювання у VESTA, яке підтверджує, що кожен іон металу займає окремий сорбційний фрагмент полімеру, а тип взаємодії визначається специфікою функціональної групи та жорсткістю/м'якістю катіона за Пірсоном.

Пояснення отриманих експериментальних тенденцій здійснювали на основі молекулярно-структурного моделювання з використанням програмного забезпечення VESTA.

Для наочного представлення механізмів сорбції іонів важких металів хітозаном виконано молекулярно-структурне моделювання з використанням програмного забезпечення VESTA, результати якого подано на Рисунку 1. Змодельовано окремі фрагменти полімерного ланцюга, що включають аміногрупи ( $-\text{NH}_2$ ) та гідроксильні групи ( $-\text{OH}$ ). Кожен іон металу ( $\text{Cu}^{2+}$ ,  $\text{Zn}^{2+}$ ,  $\text{Cd}^{2+}$ ,  $\text{Pb}^{2+}$ ) розміщено на окремому структурному фрагменті, відповідно до принципу “один іон – один фрагмент”. При цьому  $\text{Cu}^{2+}$  та  $\text{Zn}^{2+}$  формують монодентатні або бідентатні комплекси з аміногрупами, а  $\text{Cd}^{2+}$  та  $\text{Pb}^{2+}$  взаємодіють з поліцентровими гідроксильними групами, враховуючи їхню м'якість за класифікацією Пірсона.

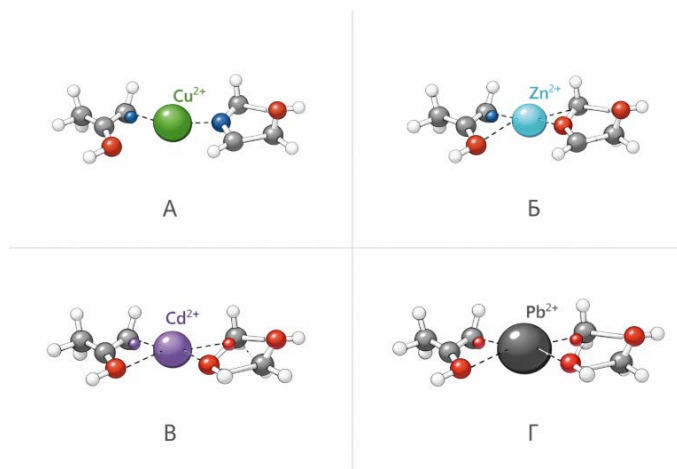


Рис. 1. Схематичне молекулярно-структурне моделювання взаємодії окремих іонів важких металів ( $\text{Cu}^{2+}$ ,  $\text{Zn}^{2+}$ ,  $\text{Cd}^{2+}$ ,  $\text{Pb}^{2+}$ ) з індивідуальними структурними фрагментами хітозану, що містять функціональні групи  $-\text{NH}_2$  та  $-\text{OH}$ , виконане у програмному середовищі VESTA: А –  $\text{Cu}^{2+}$ , Б –  $\text{Zn}^{2+}$ , В –  $\text{Cd}^{2+}$ , Г –  $\text{Pb}^{2+}$ . Пунктирними лініями позначено координаційні взаємодії між катіонами металів і донорними атомами функціональних груп хітозану

На схемі молекулярно-структурного моделювання представлено окремі структурні фрагменти хітозану, кожен з яких взаємодіє лише з одним катіоном важкого металу, що відповідає фізично коректному уявленню про процес сорбції та виключає можливість безпосереднього зближення металевих катіонів між собою. Такий підхід дозволяє наочно продемонструвати індивідуальні особливості координаційної взаємодії іонів  $\text{Cu}^{2+}$ ,  $\text{Zn}^{2+}$ ,  $\text{Cd}^{2+}$  та  $\text{Pb}^{2+}$ , з функціональними групами біополімеру.

У фрагменті А іон  $\text{Cu}^{2+}$  локалізується поблизу аміногрупи ( $-\text{NH}_2$ ), утворюючи переважно монодентатний координаційний зв'язок з донорним атомом нітрогену, що характеризується міжатомною відстанню близько 2,05 Å.

У фрагменті Б іон  $\text{Zn}^{2+}$  займає проміжне положення між аміною та гідроксильною групами, що відповідає формуванню бідентатної координації за участю атомів N та O із середньою координаційною відстанню близько 2,10 Å.

Для фрагмента В характерна взаємодія іона  $\text{Cd}^{2+}$  переважно з гідроксильними групами ( $-\text{OH}$ ), що реалізується у вигляді поліцентрової сорбції за участю атомів кисню; типові відстані зв'язку  $\text{Cd}^{2+}-\text{O}$  становлять близько 2,30 Å.

У фрагменті Г іон  $\text{Pb}^{2+}$  демонструє найбільш виражений поліцентровий характер взаємодії, координуючись одночасно з кількома гідроксильними групами одного структурного фрагмента хітозану, що супроводжується більшими координаційними відстанями  $\text{Pb}^{2+}-\text{O}$  порядку 2,45 Å.

Усі координаційні взаємодії на схемі позначено пунктирними лініями. Візуалізацію виконано з використанням єдиного масштабу, а кольорове кодування атомів і іонів (N – синій, O – червоний, C – сірий;  $\text{Cu}^{2+}$ ,  $\text{Zn}^{2+}$ ,  $\text{Cd}^{2+}$  та  $\text{Pb}^{2+}$  – відповідно до стандартних налаштувань VESTA) забезпечує чітке розмежування типів координації (рис. 1).

Порівняльну характеристику сорбційних центрів хітозану подано на рисунку 2, який узагальнює отримані модельні результати та демонструє роль окремих функціональних груп у зв'язуванні іонів важких металів.

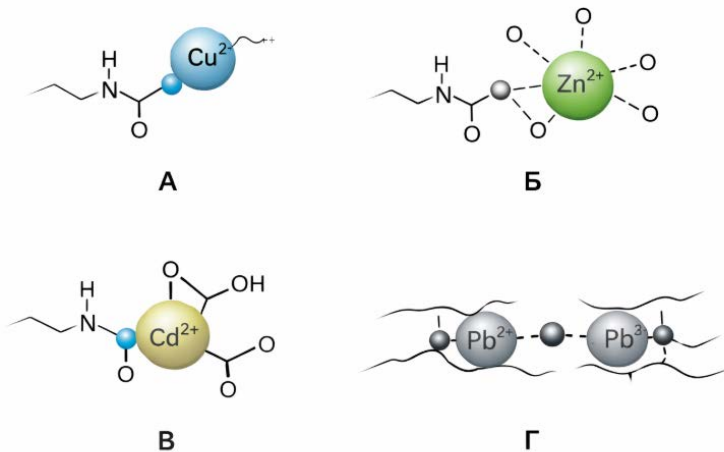


Рис. 2. Модельні типи координаційної взаємодії іонів важких металів з окремими структурними фрагментами хітозану. А – монодентатна координація іона  $\text{Cu}^{2+}$  аміногрупою  $-\text{NH}_2$ , (кислота середньої жорсткості за Пірсоном); Б – бідентатна координація іона  $\text{Zn}^{2+}$  за участю  $-\text{NH}_2$  та  $-\text{OH}$  груп (кислота середньої жорсткості); В – поліцентрова взаємодія іона  $\text{Cd}^{2+}$  з гідроксильними групами  $-\text{OH}$  одного фрагмента хітозану (м'яка кислота); Г – поліцентрове зв'язування іона  $\text{Pb}^{2+}$  між сусідніми, просторово розділеними ланцюгами хітозану (м'яка кислота)

Молекулярно-структурне моделювання свідчить, що сорбція іонів важких металів хітозаном реалізується на просторово відокремлених структурних фрагментах полімерного ланцюга, при цьому кожен координаційний вузол взаємодіє лише з одним катіоном металу. Такий підхід узгоджується з фундаментальними положеннями координаційної хімії та виключає можливість стабільного розміщення кількох іонів металів у безпосередній близькості в межах одного фрагмента хітозану.

Відповідно до теорії жорстких і м'яких кислот і основ (HSAB) Пірсона, іони  $\text{Cu}^{2+}$  та  $\text{Zn}^{2+}$  належать до кислот середньої жорсткості. Вони демонструють високу спорідненість до донорних атомів нітрогену, які характеризуються порівняно низькою поляризованістю та здатністю утворювати локалізовані координаційні зв'язки. У зв'язку з цим аміногрупи  $-\text{NH}_2$  хітозану виступають як ефективні монодентатні сорбційні центри для  $\text{Cu}^{2+}$  і  $\text{Zn}^{2+}$ , забезпечуючи формування термодинамічно стабільних комплексів на окремих структурних фрагментах полімеру. Саме така природа взаємодії пояснює високі швидкості та ступінь вилучення цих іонів, встановлені експериментально.

Іони  $\text{Cd}^{2+}$  та  $\text{Pb}^{2+}$ , які за класифікацією Пірсона належать до більш м'яких кислот, характеризуються підвищеною поляризованістю та схильністю до взаємодії з донорними атомами кисню. У цих умовах гідроксильні групи  $-\text{OH}$  хітозану забезпечують поліцентровий характер координації, при якому один іон металу взаємодіє з кількома донорними центрами, розташованими в межах одного або просторово суміжних полімерних ланцюгів. Такий розподілений механізм зв'язування зумовлює менш локалізовану координацію і пояснює дещо нижчі кінетичні параметри та ступінь сорбції  $\text{Cd}^{2+}$  і  $\text{Pb}^{2+}$  порівняно з  $\text{Cu}^{2+}$  і  $\text{Zn}^{2+}$ .

Для іона  $\text{Zn}^{2+}$  характерним є проміжний тип координаційної взаємодії, що реалізується у формі бідентатного зв'язування за участю аміногрупи та гідроксильної групи одного структурного фрагмента хітозану. Така комбінована взаємодія відображає прикордонний характер  $\text{Zn}^{2+}$  між жорсткими та м'якими кислотами і сприяє формуванню стабільних сорбційних комплексів без необхідності поліцентрового залучення кількох фрагментів полімеру.

Поліцентрове зв'язування іона  $\text{Pb}^{2+}$  реалізується між просторово розділеними ланцюгами хітозану, що узгоджується як з його м'яким кислотним характером, так і з експериментально встановленою меншою швидкістю сорбції. При цьому кожен іон металу залишається ізольованим у межах власного координаційного оточення, що повністю відповідає фізико-хімічним обмеженням моделі.

Таким чином, результати молекулярно-структурного моделювання у програмі VESTA узгоджуються з експериментальними даними сорбції та демонструють, що відмінності у швидкості й ефективності вилучення іонів  $\text{Cu}^{2+}$ ,  $\text{Zn}^{2+}$ ,  $\text{Cd}^{2+}$  та  $\text{Pb}^{2+}$  зумовлені не лише кількістю функціональних груп хітозану, а насамперед характером їх координаційної взаємодії, визначеної жорсткістю або м'якістю металевих катіонів відповідно до теорії Пірсона (Рис. 1, Рис. 2).

Експеримент показав, що хітозан достатньо ефективно сорбує всі чотири іони. Результати сорбції наведені у табл. 3.

Отримані експериментальні та модельні результати узгоджуються із сучасними уявленнями про сорбційні властивості хітозану та механізми його взаємодії з іонами важких металів. Встановлено, що ефективність зв'язування катіонів визначається хімічною природою іонів, їхнім іонним радіусом та здатністю до координаційної взаємодії з донорними атомами функціональних груп полімеру.

Аміногрупи  $-\text{NH}_2$  формують локальні монодентатні координаційні центри для іонів середньої жорсткості  $\text{Cu}^{2+}$  та  $\text{Zn}^{2+}$ , забезпечуючи стабільне зв'язування одного іона на одному структурному фрагменті. Поєднання аміногруп та гідроксильних груп  $-\text{OH}$  дозволяє утворювати бідентатні центри для  $\text{Zn}^{2+}$  на окремих фрагментах, що підвищує сорбційну здатність матеріалу.

Гідроксильні групи –ОН беруть участь у поліцентровій координації більш м'яких іонів  $\text{Cd}^{2+}$  та  $\text{Pb}^{2+}$ , при цьому один іон також взаємодіє лише з одним фрагментом, а для  $\text{Pb}^{2+}$  додатково реалізується поліцентрове зв'язування між сусідніми полімерними ланцюгами. Така просторово розділена координація забезпечує стабільне утримання катіонів, хоча швидкість сорбції дещо нижча, ніж для  $\text{Cu}^{2+}$  та  $\text{Zn}^{2+}$ .

Таким чином, комбіновані механізми взаємодії (монодентатна, бідентатна та мультицентрова координація) пояснюють високу ефективність сорбції хітозану для іонів різного характеру і демонструють відповідність між молекулярним моделюванням у VESTA та експериментальною кінетикою й ступенем вилучення катіонів.

Важливо відзначити, що ефективне зв'язування всіх досліджуваних іонів досягається без хімічної модифікації хітозану, за рахунок оптимального підбору умов процесу. Підтримання слабкокислого середовища, помірної температури та достатнього часу контакту забезпечує максимальну реалізацію потенціалу природних сорбційних центрів полімеру. Це має принципове значення для харчових технологій, де застосування модифікованих або синтетичних сорбентів є обмеженим з огляду на вимоги безпеки та нормативного регулювання.

Отримані результати свідчать про доцільність використання харчового хітозану не лише як допоміжного технологічного компонента, а й як функціонального інгредієнта, здатного знижувати біодоступність токсичних металів у харчових системах. Поєднання експериментальних даних зі спектрофотометричного аналізу та молекулярно-структурного моделювання дозволяє комплексно обґрунтувати механізми сорбції іонів важких металів та встановити відповідність між типом сорбційних центрів і практичною ефективністю процесу.

Таким чином, результати проведеного дослідження підтверджують високий потенціал хітозану як безпечного, біосумісного та технологічно придатного матеріалу для зниження вмісту іонів важких металів у харчових системах. Реалізація таких підходів відкриває перспективи створення харчових продуктів із підвищеним рівнем безпеки та функціональними властивостями, а також формує наукове підґрунтя для подальшої оптимізації використання природних біополімерів у сучасних харчових технологіях.

На основі отриманих експериментальних даних щодо сорбції іонів  $\text{Cu}^{2+}$ ,  $\text{Zn}^{2+}$ ,  $\text{Cd}^{2+}$  та  $\text{Pb}^{2+}$  нами було розроблено підходи щодо інтеграції хітозану у різні групи харчових продуктів. Проведене молекулярно-структурне моделювання функціональних груп хітозану та спектрофотометричні дослідження залишкових концентрацій іонів дозволили детально охарактеризувати сорбційні механізми:

Таблиця 3

### Відповідність типів сорбційних центрів хітозану та ефективності сорбції

Іон металу	Основні сорбційні центри хітозану	Тип координаційної взаємодії (VESTA)	Узгодженість з експериментом
$\text{Cu}^{2+}$	$-\text{NH}_2$	монодентатна координація в межах одного структурного фрагмента	висока
$\text{Zn}^{2+}$	$-\text{NH}_2$ , $-\text{OH}$	бідентатна координація в межах одного структурного фрагмента	висока
$\text{Cd}^{2+}$	$-\text{OH}$	поліцентрова координація одного іона з кількома донорними атомами одного фрагмента	середня
$\text{Pb}^{2+}$	$-\text{OH}$ (просторово суміжні ланцюги)	поліцентрова міжланцюгова координація одного іона	середня

монодентатне, бідентатне, поліцентрове та мультицентрове зв'язування. На основі цих даних авторами сформовано технологічні сценарії застосування хітозану, що передбачають його використання у безалкогольних напоях, концентратах та ферментованих продуктах. Таке поєднання експериментальної та модельної інформації дозволяє не лише прогнозувати ефективність сорбції для різних іонів, але й розробляти практично реалізовані методи інтеграції хітозану у технологічні процеси харчового виробництва.

В умовах виробництва безалкогольних напоїв, соків та столових вод хітозан може застосовуватися для зниження концентрації важких металів у рідких фазах. Висока швидкість сорбції  $\text{Cu}^{2+}$  та  $\text{Zn}^{2+}$  протягом перших 30–60 хв дозволяє використовувати хітозан у проточних або батч-системах. Оптимальні умови рН (4,0–5,5) сприяють активації аміногруп, забезпечуючи ефективне зв'язування металів без змін органолептичних властивостей продукту.

У концентрованих продуктах (соки, сиропи, рослинні екстракти) хітозан може застосовуватися на стадії підготовки сировини або після етапу концентрування. Поліцентрова взаємодія  $\text{Cd}^{2+}$  та  $\text{Pb}^{2+}$  з гідроксильними групами забезпечує стабільне утримання цих іонів навіть за підвищеної іонної сили середовища, що є критичним для концентрованих харчових систем.

У ферментованих продуктах (кисломолочні напої, ферментовані соки, закваски) хітозан може використовуватися як до, так і після стадії активної ферментації. Повільніший темп сорбції  $\text{Cd}^{2+}$  та  $\text{Pb}^{2+}$  узгоджується з тривалістю технологічних циклів ферментованих продуктів, що дозволяє забезпечити ефективне зв'язування металів без негативного впливу на активність мікроорганізмів.

Результати моделювання показали, що комбіноване використання аміногруп ( $-\text{NH}_2$ ) та гідроксильних груп ( $-\text{OH}$ ) формує бідентатні та мультицентрові сорбційні вузли, розташовані на окремих структурних фрагментах хітозану, що забезпечує ефективне зв'язування окремих іонів важких металів. Це дозволяє інтегрувати хітозан у функціональні продукти та спеціалізовані раціони, знижуючи біодоступність важких металів і підвищуючи безпеку харчових систем.

Для наочного узагальнення потенційних технологічних сценаріїв застосування хітозану у харчових продуктах складено таблицю 4.

Таблиця 4

#### Потенційні технологічні сценарії застосування хітозану у харчових продуктах

Продукт	Стадія застосування	Механізм сорбції	Основні іони, що зв'язуються
Безалкогольні напої, соки	Підготовка води або модельної рідини перед фасуванням	Монодентатна та бідентатна координація аміногруп ( $-\text{NH}_2$ ), окремі $-\text{OH}$	$\text{Cu}^{2+}$ , $\text{Zn}^{2+}$ (на різних структурних фрагментах)
Концентрати, сиропи, екстракти	Після екстракції або на етапі концентрування	Поліцентрова сорбція гідроксильних груп ( $-\text{OH}$ ), бідентатна взаємодія	$\text{Cd}^{2+}$ , $\text{Pb}^{2+}$ (на різних структурних фрагментах), $\text{Zn}^{2+}$
Ферментовані продукти (кисломолочні напої, закваски)	До або після ферментації	Монодентатна та поліцентрова координація, мультицентрові вузли на різних фрагментах	$\text{Cu}^{2+}$ , $\text{Zn}^{2+}$ , $\text{Cd}^{2+}$ , $\text{Pb}^{2+}$
Функціональні та спеціалізовані продукти	Додавання у рецептуру	Мультицентрове зв'язування комбінацією $-\text{NH}_2$ + $-\text{OH}$ (на окремих фрагментах)	$\text{Cu}^{2+}$ , $\text{Zn}^{2+}$ , $\text{Cd}^{2+}$ , $\text{Pb}^{2+}$

Узагальнення отриманих даних свідчить, що інтеграція хітозану у різні харчові системи дозволяє ефективно контролювати рівень важких металів, знижувати їх біодоступність та забезпечувати відповідність продуктів сучасним вимогам харчової безпеки.

**Висновки.** Проведене дослідження підтвердило, що харчовий хітозан зі ступенем деацетилювання 85% ефективно сорбує іони важких металів  $\text{Cu}^{2+}$ ,  $\text{Zn}^{2+}$ ,  $\text{Cd}^{2+}$  та  $\text{Pb}^{2+}$  із водних моделей харчових систем. Найвищий ступінь вилучення спостерігався для іонів  $\text{Cu}^{2+}$  (92%), трохи нижчий – для  $\text{Zn}^{2+}$  (88 %), а  $\text{Cd}^{2+}$  та  $\text{Pb}^{2+}$  характеризувалися відносно нижчою, проте технологічно значущою сорбційною здатністю (80% та 76% відповідно). Молекулярно-структурне моделювання у VESTA показало, що кожен іон металу сорбується на окремому структурному фрагменті хітозану: аміногрупи ( $-\text{NH}_2$ ) формують монодентатні та бідентатні координаційні центри для дрібних іонів середньої жорсткості  $\text{Cu}^{2+}$  та  $\text{Zn}^{2+}$ , гідроксильні групи ( $-\text{OH}$ ) забезпечують поліцентрову сорбцію більш м'яких іонів  $\text{Cd}^{2+}$  та  $\text{Pb}^{2+}$ , а поєднання  $-\text{NH}_2$  +  $-\text{OH}$  формує бідентатні та мультицентрові вузли, що підвищує сорбційну здатність полімеру.

Поєднання спектрофотометричних даних і молекулярного моделювання дозволяє пояснити відмінності у швидкості та ефективності сорбції різних іонів і підтверджує узгодженість експериментальних спостережень із структурними моделями. На основі цих результатів розроблено технологічні сценарії застосування хітозану у харчових продуктах: у безалкогольних напоях та соках – на етапі підготовки води або модельних рідин; у концентратах та сиропях – після екстракції або на стадії концентрування; у ферментованих продуктах – до або після ферментації; у функціональних та спеціалізованих продуктах – безпосередньо у рецептуру. Сорбційні механізми та локалізація активних центрів хітозану дозволяють обирати оптимальні умови для інтеграції полімеру в різні харчові системи, забезпечуючи високу ефективність зниження біодоступності токсичних металів.

Отримані результати демонструють високий потенціал хітозану як безпечного, біосумісного та технологічно придатного матеріалу для підвищення харчової безпеки та функціональних властивостей продуктів.

Перспективи подальших досліджень полягають у розширенні спектру іонів, що сорбуються, оптимізації умов застосування у складних харчових матрицях, дослідженні впливу хітозану на органолептичні властивості продуктів, а також у створенні модифікованих та композитних форм хітозану для підвищення селективності та сорбційної ємності. Такі дослідження відкривають нові можливості для інтеграції природних біополімерів у сучасні харчові технології, сприяючи розробці продуктів із підвищеною безпекою та детоксикаційними властивостями.

### СПИСОК ВИКОРИСТАНОЇ ЛІТЕРАТУРИ:

1. Tsauria Q.D., Gareso P.L., Tahir D. Systematic review of chitosan-based adsorbents for heavy metal and dye remediation // *Integrated Environmental Assessment and Management*. 2025. DOI: 10.1093/iteam/vjaf037.
2. Kaczorowska M.A., Bożejewicz D. The application of chitosan-based adsorbents for the removal of hazardous pollutants from aqueous solutions – A review // *Sustainability*. 2024. Vol. 16, № 7. P. 2615. <https://doi.org/10.3390/su16072615>.
3. Wang K., et al. Modified magnetic chitosan materials for heavy metal adsorption: a review // *RSC Advances*. 2023. Vol. 13. P. 6713–6736. <https://doi.org/10.1039/D2RA07112F>.
4. Recent advances in chitosan-based nanocomposites for adsorption and removal of heavy metal ions // *International Journal of Biological Macromolecules*. 2024. Vol. 270. P. 132386. <https://doi.org/10.1016/j.ijbiomac.2024.132386>.

5. A novel sodium iron silicate composite with chitosan for efficient removal of Cd(II) ions from water // Scientific Reports. 2025. <https://doi.org/10.1038/s41598-025-99232-0>.

6. Chitosan-based biosorption: a sustainable approach for heavy metal removal from wastewater // Processes. 2025. <https://doi.org/10.3390/ecsoc-29-26919>.

7. Modified shrimp-based chitosan as an emerging adsorbent removing heavy metals // Sustainability. 2023. Vol. 15, № 3. P. 2431. <https://doi.org/10.3390/su15032431>.

8. Research progress of adsorption and removal of heavy metals by chitosan and its derivatives: a review // Chemosphere. 2021. Vol. 279. P. 130927. <https://doi.org/10.1016/j.chemosphere.2021.130927>.

9. Adsorption of heavy metal ions using chitosan/graphene nanocomposites: a review study // ePrints Cihan University. 2025 (очікується публікація). <https://eprints.cihanuniversity.edu.iq>.

### REFERENCES:

1. Tsauria, Q. D., Gareso, P. L., & Tahir, D. (2025). Systematic review of chitosan-based adsorbents for heavy metal and dye remediation. Integrated Environmental Assessment and Management. DOI: 10.1093/inteam/vjaf037

2. Kaczorowska, M. A., & Bożejewicz, D. (2024). The application of chitosan-based adsorbents for the removal of hazardous pollutants from aqueous solutions – A review. Sustainability, 16(7), 2615. <https://doi.org/10.3390/su16072615>

3. Wang, K., et al. (2023). Modified magnetic chitosan materials for heavy metal adsorption: A review. RSC Advances, 13, 6713–6736. <https://doi.org/10.1039/D2RA07112F>

4. Recent advances in chitosan-based nanocomposites for adsorption and removal of heavy metal ions. (2024). International Journal of Biological Macromolecules, 270, 132386. <https://doi.org/10.1016/j.ijbiomac.2024.132386>

5. A novel sodium iron silicate composite with chitosan for efficient removal of Cd(II) ions from water. (2025). Scientific Reports. <https://doi.org/10.1038/s41598-025-99232-0>

6. Chitosan-based biosorption: A sustainable approach for heavy metal removal from wastewater. (2025). Processes. <https://doi.org/10.3390/ecsoc-29-26919>

7. Modified shrimp-based chitosan as an emerging adsorbent removing heavy metals. (2023). Sustainability, 15(3), 2431. <https://doi.org/10.3390/su15032431>

8. Research progress of adsorption and removal of heavy metals by chitosan and its derivatives: A review. (2021). Chemosphere, 279, 130927. <https://doi.org/10.1016/j.chemosphere.2021.130927>

9. Adsorption of heavy metal ions using chitosan/graphene nanocomposites: A review study. (2025, expected). ePrints Cihan University. <https://eprints.cihanuniversity.edu.iq>

*Дата першого надходження статті до видання: 13.12.2025*

*Дата прийняття статті до друку після рецензування: 16.01.2026*

*Дата публікації (оприлюднення) статті: 07.04.2026*