

# ИССЛЕДОВАНИЕ МЕТОДАМИ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ ПРОЦЕССА ОБРАЗОВАНИЯ НАНОЧАСТИЦ СУЛЬФИДА ЦИНКА В ПРИСУТСТВИИ БЕЛКА ФЛАГЕЛЛИНА

Филин П.Д., Жулидин П.А., Пластун И.Л.

Саратовский государственный технический университет имени Гагарина Ю.А., РФ,  
410054, Саратов, ул. Политехническая 77, +79271045551 filinbox@gmail.com

В отличие от тяжелых металлов наночастицы сульфида цинка менее токсичны, поэтому их можно использовать в качестве квантовых точек для прижизненной диагностики и мониторинга различных биопроцессов. Данное свойство побуждает ученых разрабатывать новые экологичные и эффективные методы синтеза перспективного нано материала.

Вместо традиционных способов получения ZnS, а именно физическими и химическими методами, было предложено получение сульфида цинка путем биосинтеза посредством бактерии *Bacillus subtilis* 168 [1]. Таким образом решаются основные проблемы токсичности реагентов, трудоемкости технологического процесса, а также стабилизации синтезируемых наночастиц в водных растворах и их биосовместимости.

Цель данной работы - теоретическое обоснование процесса образования сульфида цинка вблизи белка флагеллина, а также расчет оптимальной температуры биологического ансамбля.

Исследование проводилось на основе моделирования динамики молекулы белка флагеллина с помощью программного комплекса GROMACS. В качестве исследуемых объектов была рассмотрена молекула флагеллина 6GOW, ионы цинка и хлора, поскольку основной солью рабочего раствора, используемого в ходе бактериального синтеза, является хлорид цинка. Были рассчитаны следующие параметры: распределение ионов цинков возле белка флагеллина, радиус инерции и его зависимость от температуры, количество образующихся водородных связей. В результате моделирования был обнаружено, что радиуса инерции снижается при температуре раствора 300K, что соответствует оптимальным условиям протекания биологических процессов.

На основе анализа среднего радиуса инерции и распределения заряда изучена динамика молекул флагеллина. Было обнаружено, что в растворе, содержащем ионы хлора и цинка, средний радиус инерции постепенно уменьшается, указывая на то, что молекула постепенно сворачивается. Также из расчетов можно сделать вывод, что с увеличением времени количество водородных связей растет ионами цинка и аминокислотами флагеллина.

## Литература.

1. Журавлева О.А., Воейкова Т.А., Хаддаж М.Х. и др. Бактериальный синтез наночастиц сульфидов кадмия и цинка. Характеристика и перспектива их применения // Молекулярная генетика, микробиология, вирусология. 2018. № 36 (4). С. 191–198.