

АНАЛИЗ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ АМИНОКИСЛОТ ИЗ СОСТАВА ИЗОЛЯТА СЫВОРОТОЧНОГО БЕЛКА И ГИАЛУРОНОВОЙ КИСЛОТЫ

Брыксин К.А., Пластун И.Л., Гринев В.С.¹, Майорова О.А.¹

Саратовский Государственный Технический Университет имени Ю.А. Гагарина

¹Саратовский государственный исследовательский университет имени Н.Г. Чернышевского

В последнее время всё большее распространение в медицине получает направление, связанное с адресной доставкой терапевтического и диагностического агента к пораженным клеткам. В качестве таких модулей применяют антитела и другие белки, которые умеют распознавать опухолевые маркеры — молекулы, характерные для раковых клеток.

Для транспортировки лекарственных препаратов используют гидрогели.

В рамках исследования был проведен анализ соединений гиалуроновой кислоты с аминокислотами из состава изолята сывороточного белка.

Моделирование межмолекулярного взаимодействия проводилось методами теории функционала плотности с функционалом B3LYP и базисом 6-31G(d) в программном комплексе Gaussian, оптимизация молекул проводилась в программных комплексах Avogadro и GaussView.

Первым этапом было проведено исследование молекулы гиалуроновой кислоты.

На спектрах присутствует небольшой пик на частоте 3144 см⁻¹, помимо этого, присутствует пик на 3634 см⁻¹, который свидетельствует об образовании водородного связывания средней силы. Для анализа степени водородного связывания рассмотрим пик на частоте 3634 см⁻¹.

Следующим этапом было исследование комплекса гиалуроновой кислоты с аминокислотами, присутствующими в составе изолята сывороточного белка. Для рассмотрения были выбраны пролин и серин.

На основании расчетов и сравнения была составлена таблица 1.

Таблица 1. Сравнительный анализ молекулярных комплексов.

| Аминокислота | Тип связи | Длина Н-связи R, Å | Длина водородного мостика R _b , Å | Частота ν , см ⁻¹ | Частотный сдвиг $\Delta\nu$, см ⁻¹ | Энергия связи $-\Delta H$, kkal/mol | Интенсивность I _{IR} , km/mol |
|--------------|-----------|--------------------|--|----------------------------------|--|--------------------------------------|--|
| Серин | O-H...O | 1,23 | 2,05 | 3577 | 57 | 1,36 | 499 |
| Пролин | O-H...O | 1,23 | 2,5 | 3526 | 108 | 2,72 | 400 |

Исходя из полученных данных можно сделать вывод о том, что аминокислоты из состава изолята сывороточного белка при взаимодействии с гиалуроновой кислотой образуют водородную связь слабой силы. Дальнейшее исследование может выявить наиболее подходящие комплексы веществ для использования в адресной доставке лекарственных препаратов.