

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОСТРАНСТВЕННОЙ СТРУКТУРЫ ПОЛИМЕРНОГО КОМПЛЕКСА КАРНОЗИНА С ЦИНКОМ

С.Д.Демухамедова, З.И.Гаджиев, И.Н.Алиева

Бакинский Государственный Университет, Институт Физических проблем

Карнозин – природный дипептид, содержащийся в различных тканях организма и выполняющий важные физиологические функции, обладает сильными антиоксидантными и мембранопротекторными свойствами. Карнозин образует в качестве лиганда комплексы с переходными металлами, что значительно увеличивает возможности применения лекарственных препаратов, изготовленных на его основе. Известен препарат Полапрецинк, представляющий собой полимерный комплекс карнозина с цинком. Являясь переносчиком цинка такой комплекс в организме усиливает клинический эффект как ионов цинка, так и самого карнозина.

В данной работе методами теоретического моделирования с помощью пакета прикладных программ Hyper.Chem.8.06, рассчитаны параметры, характеризующие устойчивость полимерных комплексов, образованных таутомерными комплексами карнозина с атомами цинка. Моделирование пространственных структур исследуемых моделей полимеров проведены методом ММ⁺ с дальнейшим исследованием электронной структуры полуэмпирическим методом квантовой химии PM3. В качестве повторяющегося звена выбран рассчитанный нами ранее мономерный комплекс карнозина с цинком. Расчеты проводились для цепочек с числом повторяющихся звеньев $n = 6, 8, 10, 12, 16, 18, 20$ и 25 и для различных углов поворота одного мономерного звена относительно другого на $0^\circ, 60^\circ, 120^\circ$ и 180° . Расчеты показали, что увеличение длины полимерной цепочки приводит к значительному понижению полной энергии моделей, что подтверждает энергетическую предпочтительность образования именно полимерного комплекса карнозина с цинком. Различие в углах поворота приводит к незначительному изменению энергетических параметров, но существенно влияет на перераспределение зарядов на атоме цинка. Для полимерной модели карнозина N³N наблюдается сильное наталкивание и структуры с углом поворота 0° и 60° невозможны.