

# МОДЕЛИРОВАНИЕ ТЕТРАКОМПЛЕКСОВ КАРНОЗИНА С АТОМОМ МЕДИ

С.Д.Демухамедова

*Бакинский Государственный Университет, Институт Физических проблем*

Известный природный дипептид карнозин играет важную роль в организме человека. К числу его биологических свойств относится способность распознавать опасные для здоровья экзогенные и эндогенные молекулы и путем химического связывания, обезвреживать их, что позволяет использовать карнозин и его производные для профилактики и лечения различных заболеваний. Карнозин обладает способностью образовывать комплексы с различными катионами металлов, что расширяет возможности его применения. Тип образуемых комплексов строго зависит от катиона металла, соотношения металл:лиганд и значения рН раствора. Экспериментально наиболее изученными являются комплексы карнозина с медью. Наряду с мономерными и димерными комплексами экспериментальные исследования растворов с применением ЯМР- и ЭПР-спектроскопии показали, что в диапазоне рН 5-7 и при высоком соотношении карнозин: Cu(II) в координационном взаимодействии участвуют только атомы азота имидазольного кольца с образованием четырех связей N-Cu при участии N<sup>3</sup>-атомов.

Данная работа посвящена теоретическому исследованию комплексов, состоящих из четырех молекул карнозина и одного атома меди. При этом изучалась теоретическая возможность образования тетракомплекса карнозина с атомом меди для обоих его таутомерных форм N<sup>1</sup>H и N<sup>3</sup>N. Пространственная и электронная структуры тетракомплексов карнозина с атомом меди изучались полуэмпирическим методом квантовой химии PM3 с использованием пакета прикладных программ Hyper.Chem.8.06. Энергетически модель тетрамера на порядок стабильнее свободного карнозина и его мономерных и димерных комплексов. Расчет показал невозможность реализации модели такого комплекса карнозина N<sup>3</sup>N. Добавление к катиону меди в качестве пятого лиганда атома N приводит к более корректным значениям энергетических параметров для обоих таутомеров тетрамерного комплекса карнозина с атомом меди.