

# МОДЕЛИРОВАНИЕ МЕЖМОЛЕКУЛЯРНОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ УГЛЕРОДНЫХ НАНОЧАСТИЦ, БИОМОЛЕКУЛ И ЛЕКАРСТВЕННЫХ ПРЕПАРАТОВ

Пластун И.Л., Бокарев А.Н., Захаров А.А., Наумов А.А.

Саратовский государственный технический университет имени Ю.А. Гагарина,  
г.Саратов, ул. Политехническая, 77

Методами молекулярного моделирования на основе теории функционала плотности (DFT) исследуются особенности межмолекулярного взаимодействия и комплексообразования на основе водородных связей между углеродными наночастицами, биомолекулами и лекарственными препаратами. Моделирование молекулярных структур и их ансамблей выполняется с использованием функционала B3LYP с базисным набором 6-31G(d) при помощи программного комплекса Gaussian 09. На основе расчёта молекулярных структур и ИК спектров отдельных молекул и их ансамблей с последующим анализом образующихся водородных связей описываются молекулярные механизмы, лежащие в основе взаимодействия модифицированных углеродных наночастиц с биомолекулами и лекарственными препаратами.

Получено теоретическое обоснование эффектов существенного повышения терапевтической активности и снижения побочного действия при использовании карбоксилированных наноалмазов совместно с высокотоксичными лекарственными препаратами доксорубицином и митоксантроном, использующимся в ходе противоопухолевой терапии. Наличие модифицированных наноалмазов способствует удержанию данных препаратов в поражённых клетках за счёт образования супрамолекулярных ансамблей на основе водородных связей, что приводит к удержанию молекулярных комплексов в клетках на более длительный срок, и, как следствие, - к повышению терапевтического действия и снижению побочных эффектов. В ходе сравнения рассчитанных ИК спектров веществ и их комплексов было обнаружено хорошее согласие с экспериментальными данными.

Анализируется биосовместимость и возможности использования оксидированного графена в качестве средства, удерживающего лекарственные препараты в клетках. Обнаружено, что, как и в случае модифицированных наноалмазов, взаимодействие оксидированного графена с лекарствами и биомолекулами обуславливается образованием многочисленных водородных связей средней силы, что свидетельствует о проявлении супрамолекулярного взаимодействия. Рассматривается межмолекулярное взаимодействие в процессе одномолекулярного секвенирования ДНК в реальном времени, основанном на реакции полимеризации. На основе молекулярного моделирования были проанализированы параметры водородных связей в мультикомпонентной смеси, образованной нуклеотидами и молекулами рабочего раствора секвенатора. Все расчёты производились при помощи моделирования высокомолекулярных углеродных структур на основе их малоразмерных аналогов, обладающих идентичными параметрами взаимодействия. Допустимость подобных оценок обоснована хорошим согласием полученных результатов с экспериментальными данными.