

АНАЛИЗ МЕЖМОЛЕКУЛЯРНОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ БАКТЕРИОХЛОРОФИЛЛА С ПОЛЯРНЫМИ РАСТВОРИТЕЛЯМИ

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

Саратовский государственный технический университет имени Гагарина Ю.А., Россия,
410054, Саратов, ул. Политехническая 77, +79271045551, filinbox98@gmail.com

Бактериохлорофилл является фотосинтетическим пигментом зеленых серных бактерий и его оптические характеристики широко используются в различных областях, включая мониторинг физиологического состояния растений, и биодиагностику [1], производные бактериохлорофилла изучаются в контексте их потенциального применения в фотодинамической терапии рака (ФДТ).

В полярных растворителях, таких как метанол, бактериохлорофилл подвергается алломеризации, при которой выделяется мономерная форма пигмента. Это вызывает изменение спектральных свойств молекул пигмента. Экспериментальные исследования спектров поглощения бактериохлорофилла с разными растворителями показали, что они значительно отличаются по интенсивности [2], что свидетельствует о влиянии водородного связывания в этих мультикомпонентных смесях.

Нами было проведено молекулярное моделирование комплексообразования бактериохлорофилла с полярными растворителями на основе расчета структур и ИК спектров отдельных молекул и их комплексов методами теории функционала плотности (ТФП) [3] с использованием функционала B3LYP [3] и базисного набора 6-31G(d). Были проанализированы параметры водородных связей, образующихся в двухкомпонентных смесях бактериохлорофилла с этанолом, метанолом, изопропанолом и водой.

Результаты расчетов позволяют сделать вывод, что сила водородного связывания меняется в зависимости от растворителя, усиливаясь в порядке: изопропанол, этанол, метанол, вода. Однако их можно классифицировать по силе как средние, близкие к слабым. Имея дело с множеством молекул бактериохлорофилла и растворителей, можно предположить супрамолекулярное взаимодействие с большим количеством водородных связей, что подтверждает эффективность использованных растворителей. Это исследование вносит вклад в наше понимание характеристик бактериохлорофилла и его взаимодействия с различными растворителями, что может быть полезным для дальнейших исследований в области фотобиологии и наномедицины.

Литература

1. Terekhova, V.A., Gladkova, M.M. *Engineered nanomaterials in soil: Problems in assessing their effect on living organisms* // *Eurasian Soil Science*. 2013. Vol. 46. № 12. P. 1203–1210;
2. Zhiltsova A.A., Krasnova E.D., Voronov D.A., Losyuk G.N., Kokryatskaya N.M., Patsaeva S.V. *Simultaneous detection of chlorosomal bacteriochlorophylls from green sulfur bacteria and phycobilins from cyanobacteria using synchronous fluorescence scans* // *Proc. SPIE 12192, Optical Technologies for Biology and Medicine*, 2022;
3. Кон В. *Электронная структура вещества – волновые функции и функционалы плотности* // *Успехи физических наук*. 2002. Т.172, No 3. С. 336–348;