

жидкостной микроэкстракции с применением экстрагентов нового поколения.

В данной работе был разработан способ хроматографического определения бисфенолов в пищевых продуктах с предварительным микроэкстракционным выделением аналитов в термочувствительный эвтектический растворитель (Термо-ЭР). Термо-ЭР представляют собой подкласс эвтектических растворителей, чья взаимная растворимость с водой зависит от температуры экстракционной системы. В качестве экстрагентов для выделения бисфенолов были изучены двухкомпонентные Термо-ЭР на осно-

ве амфифильных аминов и среднецепочечных карбоновых кислот. Разработанный способ пробоподготовки позволяет избежать применение токсичных органических растворителей, сократить время анализа, расход реагентов и образующихся отходов.

Годунов П. А. выражает благодарность Санкт-Петербургскому государственному университету за финансирование данного исследования (ID проекта в системе Pure СПбГУ 115679504). Научные исследования частично выполнялись в ресурсном центре «Методы анализа состава вещества» Научного парка СПбГУ.

ИССЛЕДОВАНИЕ АКТИВНОСТИ ИНГИБИРОВАНИЯ α -АМИЛАЗЫ НЕКОТОРЫМИ ОРГАНИЧЕСКИМИ СОЕДИНЕНИЯМИ

К. С. Гуляндина, И. П. Шарычев

Научный руководитель – к.х.н., доцент ИШНПТ М. Л. Белянин

Национальный исследовательский Томский политехнический университет

ips1@tpu.ru

В настоящее время сахарный диабет 2-го типа – это заболевание, от которого страдают более 500 миллионов человек во всем мире. Среди пероральных противодиабетических препаратов существует множество ингибиторов α -амилазы, которые замедляют переваривание крахмала

(акарбоза, миглитол, воглибоза). Существенными недостатками данных препаратов являются часто возникающие побочные эффекты со стороны желудочно-кишечного тракта [1]. Поэтому поиск новых соединений, которые могут быть использованы в разработке лекарственных

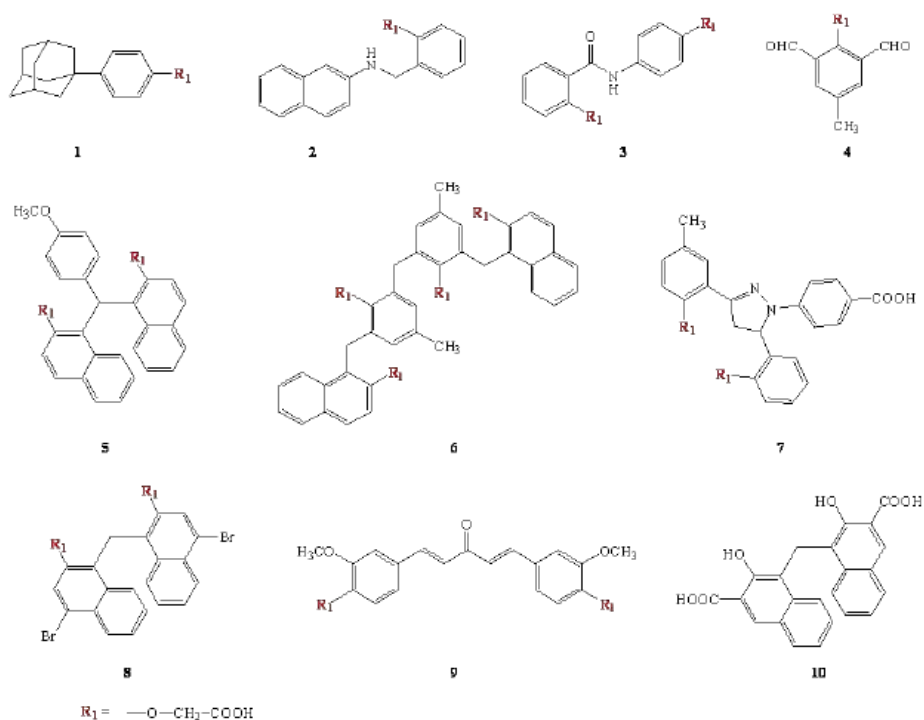


Рис. 1. Структурные формулы веществ-ингибиторов α -амилазы

средств для лечения диабета 2-го типа, является актуальной задачей в современной медицине.

По известной методике [2] был проведен скрининг 68 веществ, на основании которого определены 10 наиболее сильных ингибиторов α -амилазы (рис. 1).

В основе метода лежит качественная реакция на крахмал. При добавлении α -амилазы к субстрату происходит гидролиз крахмала через промежуточные продукты распада (декстрины) до глюкозы. Йод образует с крахмалом комплексы, окрашенные в синий цвет, в то время как глюкоза, образующаяся при ферментативном гидролизе крахмала, окрашивания с йодом не дает.

В качестве источником α -амилазы использовали водный раствор препарата, содержащего ферменты: липазу, протеазу и амилазу.

По интенсивности окраски с помощью фотометра фотоэлектрического была определена ингибиторная активность исследуемых веществ.

С помощью программных пакетов AutoDock и AutoDock Vina проведен молекулярный докинг для веществ, в ходе скрининга проявивших наибольшую ингибиторную активность к α -амилазе. Для докинга использовали молекулу белка

панкреатической свиной α -амилазы 1PIF из базы данных Pdb.org [3]. Сопоставив полученные результаты молекулярного докинга с литературными рентгеноструктурными данными для известных ингибиторов α -амилазы [4], установлено, что важное значение имеют водородные связи с аминокислотными остатками Asp197, Glu233 и Asp300, а в меньшей степени с аминокислотными остатками Trp58, Trp59, Tyr62, Ile235 и His305. Для контроля результатов был проведен докинг с веществами, при скрининге не показавшими ингибиторную активность к α -амилазе (связывание с вышеперечисленными аминокислотными остатками не происходит).

Таким образом, на данном этапе работы были найдены 10 веществ, которые являются потенциальными ингибиторами α -амилазы. Молекулярный докинг доказал, что эти соединения образуют водородные связи с аминокислотами активного центра α -амилазы, отвечающими за гидролитическую способность фермента расщеплять крахмал. Однако более точные результаты даст исследование взаимодействия веществ с белком методом молекулярной динамики.

Список литературы

1. Leslie K., Zhang X. // *Natural Chemical Biology*. – 2015. – Vol. 11. – № 9. – P. 691–698.
2. Leslie K., Li Ch., Stephen G. Withers // *Medicinal chemistry*. – 2012. – Vol. 55. – № 22. – P. 10177–10186.
3. Machius M., Vértesy L. // *Journal of Molecular Biology*. – 1996. – Vol. 260. – № 4. – P. 409–421.
4. Brayer G.D., Luo Y., Withers S.G. // *Protein Science*. – 1995. – Vol. 4. – № 9. – P. 1730–1742.

ОПРЕДЕЛЕНИЕ ФЛАВОНОИДОВ В ВОРОХЕ ОБЛЕПИХИ КРУШИНОВИДНОЙ МЕТОДАМИ СПЕКТРОФОТОМЕТРИИ И ВЭЖХ

А. А. Гуренкова, А. П. Чернова

Научный руководитель – к.х.н., доцент А. П. Чернова

Национальный исследовательский Томский политехнический университет

634050, Россия, г. Томск, проспект Ленина, 30

aag122@tpu.ru

Облепиха крушиновидная является ценным источником БАВ и с давних пор ее различные части (ягоды, ветки, листья) используются для различных целей, а именно в пищевой, фармацевтической и косметической промышленности. Чаще всего переработке подвергается лишь плодовая часть. Ворох сжигают или выбрасывают, как мусор. Однако, согласно исследованиям [1], кора и побеги облепихи крушиновидной так-

же богаты ценными биологически активными веществами, включая флавоноиды. Эти вещества обладают полезными фармакологическими свойствами, а именно противовоспалительным, кровоостанавливающим, мочегонным, а также положительно влияют на сердечно-сосудистую систему.

Целью работы является определение суммы флавоноидов спектрофотометрическим методом