

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

и отдельных флавоноидов методом ВЭЖХ в экстрактах вороха облепихи крушиновидной.

Для работы использовался ворох облепихи крушиновидной, собранный осенью 2023 года в Алтайском крае. Сырье подвергалось 3-х кратной экстракции в двух температурных режимах – при комнатной температуре и при 60 °С. В качестве экстрагента выступала вода. Сушка проводилась возгонкой под давлением в течение 15 ч и испарением под вакуумом в течение 4 ч 15 мин.

Определение суммы флавоноидов проводили спектрофотометрическим методом после взаимодействия с 10 % $AlCl_3$ в присутствии 10 % HCl при $\lambda = 415$ нм. Результаты представлены в таблице 1.

Разделение и идентификацию отдельных флавоноидов проводили на хроматографе «Миллихром А-02» с обращено-фазовой колонкой. В качестве подвижной фазы выступала смесь CH_3CN и 0,1 % CF_3COOH . Элюирование проводилось в линейном градиентном режиме от 0,1 % CF_3COOH (100 %) до CH_3CN (100 %) при 35 °С со скоростью потока 0,15 cm^3/min . УФ-детекти-

рование рутина и кверцетина проводилось при $\lambda = 360$ нм, дигидрокверцетина – при 280 нм [2].

Установлено, что в ворохе облепихи крушиновидной присутствуют такие флавоноиды как рутин, кверцетин и дигидрокверцетин. Наибольшее содержание суммы флавоноидов обнаружено в экстракте листьев, полученном при 60 °С в течение 2 ч. Таким образом, на выход БАВ влияет анатомия сырья и режим экстрагирования. Следовательно, можно говорить о том, что ворох облепихи крушиновидной является ценным источником БАВ и может быть использован в различных областях промышленности.

Таблица 1. Содержание суммы флавоноидов в экстрактах вороха облепихи крушиновидной

№	Сырье	Время экстракции	Содержание, %
1	Ветки	40 мин	6,07 ± 0,32
2		2 ч	8,6 ± 0,3
3	Листья	40 мин	7,7 ± 0,4
4		2 ч	9,4 ± 0,2

Список литературы

1. Азарова О.В. Дисс. Кора и побеги облепихи крушиновидной – новый сырьевой источник биологически активных веществ канд. биол. наук. – Барнаул : АГМУ, 1998. – 145 с.
2. Рогачев А.Д. Дисс. Фитохимическое исследование *Rhodo-dendron adamsii* канд. хим. наук. – Новосибирск : НИОХ СО РАН, 2008. – 121 с.

ОПРЕДЕЛЕНИЕ 5-ГИДРОКСИТРИПТАМИНА В СУХИХ ЭКСТРАКТАХ НЕПЛОДОВОЙ ЧАСТИ ОБЛЕПИХИ КРУШИНОВИДНОЙ

А. Е. Давыдкина^{1,2}, Д. А. Бейсембаева¹, А. П. Чернова¹
 Научный руководитель – к.х.н., доцент А. П. Чернова

¹Национальный исследовательский Томский политехнический университет
 634050, Россия, г. Томск, проспект Ленина, 30
 aed11@tpu.ru

²ФГБУН Институт мониторинга климатических и экологических систем СО РАН
 634055, Россия, г. Томск, проспект Академический, 10/3
 aed11@tpu.ru

Облепиха крушиновидная (*Hipporhae rhamnoides L.*) представляет собой листопадный кустарник, широко распространенный в Азии и Западной Европе, а также на таких территориях России, как Алтайский край, Забайкалье, Саяны, Северный Кавказ, Бурятия и Владимирская область. Практически все части облепихи (ягоды, корни, листья, кора) содержат фенольные

соединения – флавоноиды (например, рутин, кверцетин, кемпферол), фенольные кислоты, дубильные вещества, витамины (токоферолы, каротиноиды, аскорбиновая кислота, фолиевая кислота, витамины В₁, В₂ и др.), белок, аминокислоты, минеральные вещества (Fe, Ca, P и K), органические кислоты (хинная кислота, яблочная кислота, щавелевая кислота и винная кис-