
СИСТЕМНЫЙ АНАЛИЗ И МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ

УДК 544.723.52

МОДЕЛИРОВАНИЕ МЕХАНИЗМОВ АДсорбЦИИ ТЕТРАЦИКЛИНА НА ОКСИДАХ КРЕМНИЯ, АЛЮМИНИЯ И АЛЮМОСИЛИКАТАХ

Салмахаева Альфия Манцуровна, ассистент, Астраханский государственный университет, 414056, Россия, Астрахань, Татищева, 20 а, e-mail: alfia2007@mail.ru.

Алыков Нариман Мирзаевич, доктор химических наук, профессор, Астраханский государственный университет, 414056, Россия, Астрахань, Татищева, 20 а, e-mail: zoloto.chem@mail.ru.

Золотарева Наталья Валерьевна, кандидат технических наук, Астраханский государственный университет, 414056, Россия, Астрахань, Татищева, 20 а, e-mail: zoloto.chem@mail.ru.

Алыкова Тамара Владимировна, кандидат химических наук, Астраханский государственный университет, 414056, Россия, Астрахань, Татищева, 20 а, e-mail: zoloto.chem@mail.ru.

Приведены результаты квантово-химических расчетов, на основании которых смоделированы процессы адсорбции тетрациклина на кластерах различных сорбентов (алюмосиликат, оксид кремния, оксид алюминия).

Изучены возможные механизмы образования как водородных, так и донорно-акцепторных связей. Основными функциональными группами тетрациклина, участвующими при образовании различных типов связей при адсорбции, являются аминогруппа, азоты (протонированные), гидроксогруппы, метильная группа, карбонильная группа, диметиламиногруппа и другие.

В результате расчетов были выделены энергетически более выгодные конфигурации в системах «алюмосиликат – тетрациклин», «оксид кремния – тетрациклин», «оксид алюминия – тетрациклин».

Установлено, что адсорбция тетрациклина сорбентом СВ-1 обусловлена участием акцептора электронных пар – положительно заряженного азота – и доноров электронных пар – кислорода силанольных, силоксановых и мостиковых групп рассматриваемых в статье кластеров сорбента. Одновременно адсорбция тетрациклина сопровождается образованием различных видов связей – водородных, Ван-дер-Ваальсовых и ионных.

Адсорбция тетрациклина оксидом кремния сопровождается возникновением электростатического взаимодействия, формированием водородных связей, а также Ван-дер-Ваальсового взаимодействия.

В результате адсорбции тетрациклина оксидом алюминия между сорбентом и сорбатом возникают водородные связи, и возникает достаточно сильное электростатическое взаимодействие, при этом также наблюдается взаимодействие Ван-дер-Ваальсовых сил.

Ключевые слова: моделирование, квантово-химические расчеты, кластер, оксиды кремния и алюминия, алюмосиликаты, тетрациклин, адсорбция, энергия адсорбции.

MODELLING OF MECHANISMS OF TETRACYCLINE ADSORPTION ON OXIDES OF SILICON, ALUMINUM AND ALUMOSILICATES

Salmakhaeva Alfiya M., Lecturer, Astrakhan State University, 20a Tatishchev str., Astrakhan, 414056, Russia, e-mail: alfia2007@mail.ru.

Alykov Nariman M., Dr. Sc. in Chemistry, Astrakhan State University, 20a Tatishchev str., Astrakhan, 414056, Russia, e-mail: zoloto.chem@mail.ru.

Zolotareva Nataliya V., Cand. in Technics, Astrakhan State University, 20a Tatishchev str., Astrakhan, 414056, Russia, e-mail: zoloto.chem@mail.ru.

Alykova Tamara V., Cand. in Chemistry, Astrakhan State University, 20a Tatishchev str., Astrakhan, 414056, Russia, e-mail: zoloto.chem@mail.ru.

The results of quantum chemical calculations, which are modeled on the basis of the adsorption of tetracycline on clusters of different sorbents (aluminosilicate, silicon oxide, aluminum oxide) are presented in the article.

The possible mechanisms of hydrogen as well as donor-acceptor bonds are studied. The main functional groups of tetracycline involved in the formation of different types of bonds during the adsorption, are amino group, nitrogen (protonated), hydroxyl group, methyl group, carbonyl group, dimethylamine group and others.

Energetically more favorable configurations of systems “aluminosilicate – tetracycline”, “silica – tetracycline”, “aluminum oxide – tetracycline” are identified as a result of the calculations.

It is established that the adsorption of tetracycline sorbent CB-1 is due to the participation of an acceptor of electron pairs – the positively charged nitrogen and the donor electron pairs – the oxygen of silanol, siloxane and bridge groups of clusters of the sorbent considered in the article. Simultaneously the adsorption of tetracycline is followed by the formation of various types of bonds – hydrogen, Van-der-Waals and ionic.

Adsorption of tetracycline silica is accompanied by the electrostatic interaction and the formation of hydrogen bonds and Van-der-Waals interactions.

As a result of the adsorption of tetracycline with aluminum oxide between the sorbent and sorbate hydrogen bonds occur and there is sufficiently strong electrostatic interaction, while the interaction of the Van-der-Waals forces is also observed.

Key words: *modeling, quantum-chemical calculations, cluster, silica, aluminum oxide, aluminum silicates, tetracycline, adsorption, adsorption energy.*

Квантово-химические исследования системы «сорбент – сорбат» позволяют на уровне электронных взаимодействий установить возможность направленной сорбции различных веществ. Расчеты адсорбции молекул тетрациклина на поверхности оксидов кремния, алюминия и алюмосиликатов выполнены с использованием полуэмпирического PM3 метода по программе GAMESS.

Для реализации поставленной задачи на компьютере используется кластерный подход, который позволяет решить проблему, связанную с оформлением и подготовкой изучаемых моделей к квантово-химическому исследованию. Из множества элементов поверхностей выделены схожие, тесно связанные друг с другом функциональные группы. В результате сложная молекулярная модель дифференцируется на небольшие составляющие, и все расчеты проводятся только для этих компонентов.

Модельные кластеры поверхности кремнезема и алюмосиликата содержат следующие активные центры: неполностью координированный атом Al, силанольную $\equiv\text{SiOH}$ и силосановую $=\text{Si=O}$ группы, адсорбированные молекулы воды, мостиковую OH-группу.

Граничные условия для кластеров учитывали при помощи модели орбитально-стехиометрического кластера (ОСК), в основе которой заложено разделение твердого тела на ковалентно-квазинеzависимые кластерные псевдо ячейки. Поскольку выделяемый фрагмент представляет собой кристаллическую псевдо ячейку, то орбитальный, электронный и

СИСТЕМНЫЙ АНАЛИЗ И МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ

основной состав ОСК, моделирующего объемный фрагмент идеального кристалла, должен соответствовать стехиометрии моделируемого объекта. В базисный набор ОСК входят все валентные атомные орбитали и электроны внутренних атомов, а от граничных атомов – только те гибридные локализованные орбитали, которые отвечают σ -связям с внутренними атомами [1–3].

Переход от ОСК, моделирующего объемную структуру твердого тела, к кластерным моделям поверхностных центров осуществляется разделением «объемного» ОСК на составные части, соответствующие моделируемым центрам поверхности. Граничные связи кластеров сорбентов замыкали на граничном атоме кремния Si^* . Каждый атом Si^* вносит в базис ОСК одну sp^3 -гибридную орбиталь, ориентированную к соседнему внутрискластерному атому кислорода.

На рисунке 1 приведены использованные в расчетах модели кластеров, содержащих активные центры поверхности оксидов кремния, алюминия и алюмосиликатов (сорбент СВ-1).

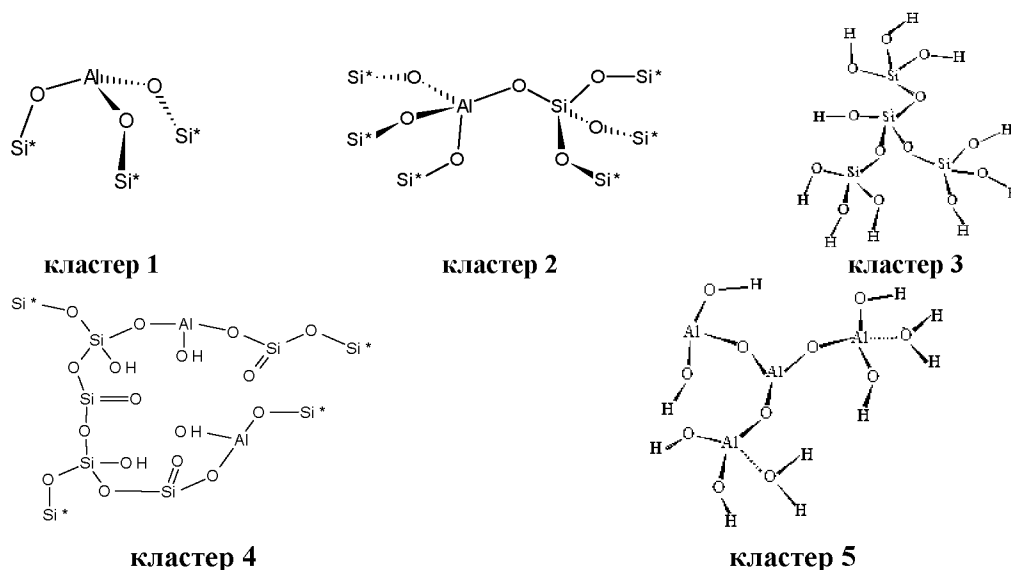


Рис. 1. Структуры кластеров сорбентов

Рассмотрены свойства и строение молекулярных моделей алюмосиликата, силикагеля (оксида кремния), оксида алюминия и тетрациклина (ТЦ). Основными функциональными группами тетрациклина, участвующими в образовании различных типов связей при его адсорбции, являются: аминогруппа, азоты (протонированные), OH-группы, CH_3 -группа, карбонильная группа, диметиламиногруппа и другие.

На первоначальном этапе данные модели подвергались молекулярно-динамической обработке с использованием силового поля ММ2 Элинджер [4]. На поверхности потенциальной энергии были установлены локальные минимумы данных структур, что позволило определить их оптимальные конфигурации.

Моделирование в системе «тетрациклин – алюмосиликат»

Рассмотрено 38 возможных вариантов образования донорно-акцепторной и водородной связей тетрациклина с функциональными группами модели алюмосиликата. В результате расчетов были выделены энергетически более выгодные конфигурации взаимодействий. На рисунке 2 приведены лишь некоторые примеры адсорбционных систем (АДС).

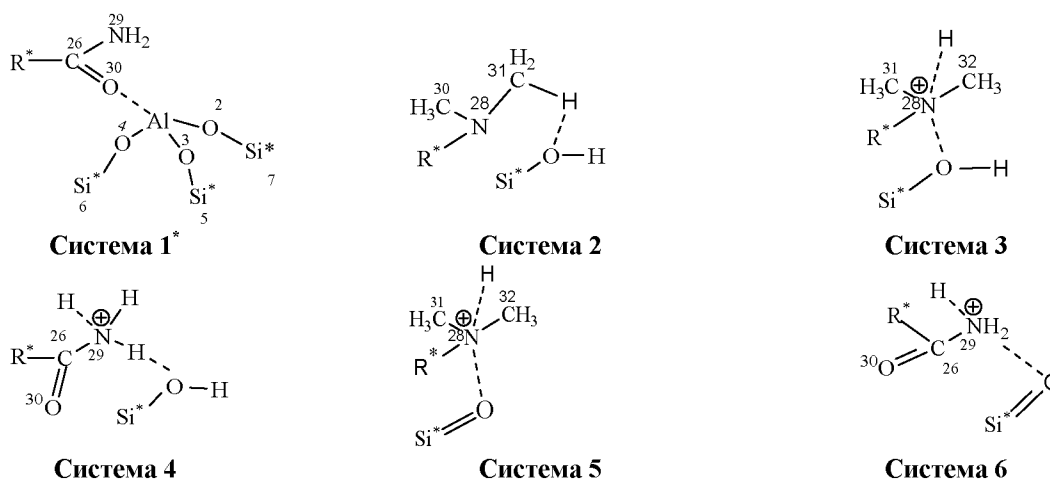


Рис. 2. Системы межмолекулярного взаимодействия «тетрациклин – алюмосиликат»

Согласно приведенным моделям, взаимодействие преимущественно происходит по типу донорно-акцепторной связи Al...O и водородной – по OH- и NH₂-группам ТЦ. Смоделированные системы представляют наибольший интерес для изучения, так как являются наиболее устойчивыми формами существования интермедиатов.

Для описания полученных систем использовали следующие показатели: r , Å – расстояние между атомами реагирующих молекул; Δq , e – перенос заряда на молекулу ТЦ; $\Delta E_{адс}$, кДж/моль – энергия адсорбции. За условными изменениями в электронной конфигурации можно проследить по значениям зарядов на атомах (q_i), определяющих некоторое интегральное значение электронной плотности вблизи каждого атома. Об изменениях электронной плотности при образовании молекулярной системы из отдельных подсистем судят по величине переноса заряда Δq с кластера на молекулу ТЦ:

$$\Delta q = \sum_{i=1}^N q_i \quad (1)$$

где N – общее количество атомов, а q_i – заряд i -того атома.

Тепловые эффекты ($\Delta E_{адс}$, кДж/моль) формирования предполагаемых систем рассчитывали как:

$$\Delta E_{адс} = E_{полн}(система) - [E_{полн}(кластер) + E_{полн}(ТЦ)] \quad (2)$$

По показателям энергии адсорбции и длине связи между атомами взаимодействующих молекул судят о стабильности образующихся систем. Для наиболее выгодного положения энергия адсорбции будет наименьшей.

В таблице 1 сведены геометрические и энергетические параметры моделируемых систем «тетрациклин-алюмосиликат».

Полученные результаты позволяют оценить энергию взаимодействия, а также выявить наиболее активный центр алюмосиликата, способный легко подвергаться направленному влиянию со стороны ТЦ.

Система 1 образуется в результате донорно-акцепторного взаимодействия O₃₀ карбонильной группы ТЦ с атомом Al алюмосиликата. Величины зарядов на атомах и длины связей Al–O (1,76Å) в алюмосиликате близки по значению с образующейся донорно-акцепторной связью (1,87Å). Это позволило сделать предположение о формировании комплекса [AlO₄]⁵⁻.

R* – углерод ароматического кольца.

СИСТЕМНЫЙ АНАЛИЗ И МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ

Таблица 1

Геометрические и энергетические параметры
моделируемых систем «тетрациклин – алюмосиликат»

АДС		PM3		
		$r, \text{Å}$	$\Delta q, e$	$-\Delta E_{адс}, \text{кДж/моль}$
1	$\text{O}_{30}\dots\text{Al}$	1,88	0,26	7,08
2	$\text{Si}(\text{H})\text{O}\dots\text{HCH}_2\text{-N}_{28}\text{CH}_3$	1,80	0,29	4,78
3	$\text{Si}(\text{H})\text{O}\dots\text{N}_{28}^+(\text{H}(\text{CH}_3)_2)$	2,24	-1,18	13,76
4	$\text{Si}(\text{H})\text{O}\dots\text{N}_{29}^+(\text{H}_3)$	2,64	-0,58	18,21
5	$\text{SiO}\dots\text{N}_{28}^+(\text{H}(\text{CH}_3)_2)$	2,65	-1,32	30,56
6	$\text{SiO}\dots\text{N}_{29}^+(\text{H}_3)$	2,69	-0,93	31,35

Перенос заряда на молекулу ТЦ составляет 0,26e. Это говорит о том, что происходит искажение геометрии, а незначительное увеличение длины химической связи $\text{C}_{26}\text{-O}_{30}$ (до 1,23Å и после 1,30Å) обусловлено стабилизацией донорно-акцепторной связи $\text{O}_{30}\dots\text{Al}$.

В системе 2 происходит образование водородной связи между водородом метильной группы молекулы ТЦ и кислородом силанольной группы алюмосиликата. Увеличение длины связи C-H в метильной группе молекулы ТЦ (до 1,10Å и после 1,12Å) свидетельствует о частичном переносе электронной плотности от протона на кислород силанольной группы алюмосиликата.

Система 3 образуется в результате донорно-акцепторного взаимодействия протонированного азота (N_{28}^+) диметиламиногруппы ТЦ с атомом кислорода силанольной группы алюмосиликата. Отрицательное значение переноса заряда в системе ($\Delta q = -1,18e$) на протон ТЦ приводит как к геометрическому искажению структуры в целом, так и функциональной группы, вступающей во взаимодействие. Подобное не наблюдается в молекулярной форме ТЦ.

Система 4 образуется в результате донорно-акцепторного взаимодействия протонированного азота (N_{29}^+) аминогруппы ТЦ с атомом кислорода силанольной группы алюмосиликата. Уменьшение длины химической связи $\text{N}_{29}\text{-C}_{26}$ (до 1,54Å и после 1,50Å) и соответственно увеличение длины связи $\text{N}_{29}\text{-H}$ (до 1,00Å и после 1,03Å) в ионной форме ТЦ приводят к незначительному искажению исходной геометрии ТЦ. Однако увеличение переноса заряда (табл. 1) приводит к противоположным выводам. Такие изменения могут быть вызваны сильной поляризацией связи $>\text{Si-OH}$ за счет увеличения на кислороде электронной плотности $q(-0,48)/q(-0,60)$. Подобное не наблюдается в молекулярной форме ТЦ.

Уменьшение величины заряда на N_{29} $q(0,641)/q(0,472)$ также свидетельствует о переносе плотности от кислорода силанольной группы кластера алюмосиликата на протонированный азот (N_{29}^+) аминогруппы ТЦ.

Система 5 образуется в результате донорно-акцепторного взаимодействия протонированного азота (N_{28}^+) диметиламиногруппы ТЦ с атомом кислорода силоксановой группы алюмосиликата. Резкое увеличение переноса заряда ($\Delta q = -1,32e$) на протон ТЦ приводит как к геометрическому искажению по функциональной группе, так и структуры в целом. Подобное не наблюдается в молекулярной форме ТЦ.

Система 6 также образуется в результате донорно-акцепторного взаимодействия протонированного азота (N_{29}^+) аминогруппы ТЦ с атомом кислорода силоксановой группы алюмосиликата. Наблюдается уменьшение длины химической связи $\text{N}_{29}\text{-C}_{26}$ (до 1,53Å и после 1,49Å) и увеличение длины связи $\text{N}_{29}\text{-H}$ (до 1,00Å и после 1,038Å) в ионной форме ТЦ, что приводит к незначительному искажению исходной геометрии ТЦ. Однако увеличение переноса заряда ($\Delta q = -0,93e$) на протон ТЦ приводит к противоположным выводам. Подобное не наблюдается в молекулярной форме ТЦ.

Полученные квантово-химические результаты позволяют предположить, что в реальной системе возможно протекание различных процессов, однако расчеты позволяют сделать вывод о том, что наиболее устойчивыми из рассмотренных будут системы 3–6. Это системы, преимущественно образованные при участии протонированной формы молекулы ТЦ. В результате при исследовании 38 моделей АДС можно отметить, что в среднем энергия адсорбции ТЦ на алюмосиликате (сорбенте СВ-1) может составить около $-10,5$ кДж/моль.

Моделирование в системе «тетрациклин – оксид кремния»

Аналогичная процедура проведена для моделирования взаимодействий в системе «тетрациклин – оксид кремния». В результате расчетов также были выделены энергетически более выгодные конфигурации. Рассмотрено 14 возможных вариантов образования донорно-акцепторных и водородных связей с ТЦ. Расчеты показали, что в среднем энергия адсорбции ТЦ на оксиде кремния (силикагель КСМГ) может составить около $-9,35$ кДж/моль.

Моделирование в системе «тетрациклин – оксид алюминия»

Для реакционных центров оксида алюминия рассмотрено 26 возможных вариантов образования донорно-акцепторных и водородных связей с ТЦ. Полученные результаты всех модельных систем позволили предположить, что реальная энергия адсорбции ТЦ на оксиде алюминия может составить в среднем $-8,5$ кДж/моль.

Результаты и их обсуждение

Квантово-химический аппарат не только позволил смоделировать процесс адсорбции ТЦ на кластерах различных сорбентов (алюмосиликат, оксид кремния, оксид алюминия), но и изучить возможные механизмы образования как водородных, так и донорно-акцепторных связей. Анализ результатов также позволил сделать следующее заключение: тетрациклин образует наиболее прочные АДС только с алюмосиликатами. Это положение было обосновано квантово-химическими расчетами энергии образования адсорбционных комплексов ТЦ с кластерами 1–5.

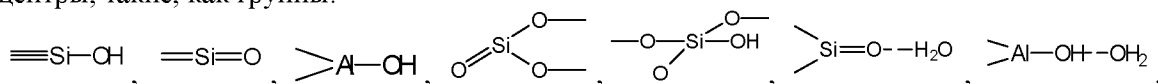
Сравнение экспериментальных и теоретических данных по адсорбции ТЦ на кластерах 1–5 приведено в таблице 2.

Таблица 2

Энергии адсорбции ТЦ, полученные в результате квантово-химических расчетов ($\Delta E_{\text{расч}}$) и эксперимента ($\Delta E_{\text{эксп}}$) (кДж/моль). Расчеты проведены методом РМ3

Сорбат	– $\Delta E_{\text{расч}}$ для кластеров				
	КЛ-1	КЛ-2	КЛ-3	КЛ-4	КЛ-5
Тетрациклин	8,15	8,2	9,35	10,5	8,5
	– $\Delta E_{\text{эксп}}$ для сорбентов				
	Оксид алюминия		Силикагель КСМГ		СВ-1
	8,41		9,4		10,47

Анализ экспериментального и теоретического изучения адсорбции тетрациклина, содержащего целый набор различных функциональных групп, позволяет сделать заключение, сводящееся к следующему. Кластеры 1–5 построены идентично, все они содержат активные центры, такие, как группы:



т.е. у тетрациклина имеется широкая возможность к адсорбции по различным механизмам.

Как видно из результатов, представленных в таблице 2, экспериментальная энергия сорбции тетрациклина на оксиде алюминия близка к теоретически рассчитанным величинам энергии сорбции тетрациклина на кластере 5, на силикагеле КСМГ – на кластере 3 и на сорбенте СВ-1 – на кластере 4.

СИСТЕМНЫЙ АНАЛИЗ И МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ

При оптимальном рН сорбции ТЦ на оксиде алюминия у сорбента формируются кластеры, содержащие гидроксильные группы. Это означает, что в области максимальной сорбции на оксиде алюминия между сорбентом и сорбатом возникают водородные связи и достаточно сильное электростатическое взаимодействие, при этом также наблюдается взаимодействие Ван-дер-Ваальсовых сил.

На силикагеле КСМГ максимальная сорбция тетрациклина наблюдается в слабощелочной среде. В слабощелочной среде силикагель имеет кластер аналогичный кластеру оксида алюминия в нейтральной и слабощелочной среде, поэтому в области максимальной сорбции для силикагеля характерны электростатические взаимодействия, формирование водородных связей, а также Ван-дер-Ваальсового взаимодействия.

Сорбент СВ-1 является универсальным. Адсорбция происходит от слабощелочной до щелочной среды. Сорбент СВ-1 содержит как в кислой, так и слабощелочной среде, за счет оксидов алюминия и кремния, группы характерные отдельно для оксида кремния и отдельно для оксида алюминия.

В связи с этим адсорбция тетрациклина на сорбенте СВ-1, протекает с формированием водородных связей за счет Ван-дер-Ваальсовых сил и электростатического взаимодействия в области рН адсорбции и оксида кремния и оксида алюминия (рН 3–9).

Так как опоки, используемые для производства сорбента СВ-1, содержат в своей структуре также и кластеры, представляющие собой особое образование из силонольных и силоксановых групп, которые являются аналогом известных в органической химии макроциклических соединений, имеющих внутримолекулярную полость для связывания ионов и молекул, т.е. представляющие собой неорганические ионофоры, то СВ-1 избирательно поглощает ионы металлов, которые имеют вакантные орбитали, а также органические соединения, содержащие первичную, вторичную и четвертичную аминогруппы. Такие группы атомов характерны для тетрациклиновых антибиотиков.

Таким образом, адсорбция тетрациклина сорбентом СВ-1 связана с участием в сорбционном процессе акцептора электронных пар – положительно заряженного азота и доноров электронных пар – кислорода силонольных, силоксановых и мостиковых групп кластеров сорбента СВ-1. Одновременно адсорбция ТЦ сопровождается образованием различных видов связей – водородных, Ван-дер-Ваальсовых и ионных.

Список литературы

1. Алыкова Т. В. Моделирование механизмов адсорбции ряда органических веществ на алюмосиликатах / Т. В. Алыкова, Н. М. Алыков, К. П. Пашенко, И. И. Воронин, Н. Н. Алыков // Известия вузов. Химия и хим. технол. – 2003. – Т. 46, № 6. – С. 31–33.
2. Алыкова Т. В. Расчет моделей адсорбционных комплексов молекул ароматических соединений с активными центрами поверхности кремнезема и алюмосиликатов / Т. В. Алыкова, К. П. Пашенко // Известия вузов. Химия и хим. технол. – 2004. – Т. 47, № 2. – С. 114–118.
3. Алыков Н. М. Квантово-химическое кластерное моделирование адсорбции ароматических углеводородов / Н. М. Алыков, Т. В. Алыкова, К. П. Пашенко // Естественные науки. – 2002. – № 4. – С. 206–214.
4. Соловьев М. Е. Компьютерная химия / М. Е. Соловьев, М. М. Соловьев. – М. : СОЛОН Пресс, 2005. – 536 с.

References

1. Alykova T. V. Modelirovanie mehanizmov adsorbicii ryada organicheskikh veshestv na alyumosilikatah / T. V. Alykova, N. M. Alykov, K. P. Pashenko, I. I. Voronin, N. N. Alykov // Izvestiya vuzov. Himiya i him. tehnol. – 2003. – T. 46, № 6. – S. 31–33.
2. Alykova T. V. Raschet modelei adsorbcionnykh kompleksov molekul aromaticeskikh soedinenii s aktivnymi centrami poverlnosti kremnezema i alyumosilikatov / T. V. Alykova, K. P. Pashenko // Izvestiya vuzov. Himiya i him. tehnol. – 2004. – T. 47, № 2. – S. 114–118.

3. Alykov N. M. Kvantovo-himicheskoe klasternoe modelirovanie adsorbicii aromaticeskikh uglevodородov / N. M. Alykov, T. V. Alykova, K. P. Pashenko // Estestvennye nauki. – 2002. – № 4. – S. 206–214.

4. Solov'ev M. E. Komp'yuternaya himiya / M. E. Solov'ev, M. M. Solov'ev. – M. : SOLON Press, 2005. – 536 s.

УДК 004.942; 547.96; 544.18

КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ ВОЗДЕЙСТВИЯ МОЛЕКУЛЫ ЭФЕДРИНА НА СТРУКТУРНЫЕ КОМПОНЕНТЫ КЛЕТОЧНОЙ МЕМБРАНЫ

Сиротин Андрей Николаевич, студент, Астраханский государственный университет, 414056, Россия, Астрахань, Татищева, 20 а, e-mail: asirotin@mail.ru

Жарких Леся Ивановна, кандидат технических наук, Астраханский государственный университет, 414056, Россия, Астрахань, Татищева, 20 а, e-mail: lesy_g@mail.ru.

Алыков Нариман Мирзаевич, доктор химических наук, профессор, Астраханский государственный университет, 414056, Россия, Астрахань, Татищева, 20 а, e-mail: lesy_g@mail.ru.

В данной работе исследовано воздействие эфедрина на компоненты клеточной мембраны, для этого произведено разделение клеточной мембраны на отдельные элементы – белки, липиды, углеводы – с целью поиска наиболее устойчивых адсорбционных комплексов эфедрина с данными компонентами. Произведены квантово-химические расчеты с помощью программного комплекса GAMESS полуэмпирическим методом PM3. Построены адсорбционные комплексы взаимодействия эфедрина с компонентами клеточной мембраны, среди которых выбраны наиболее устойчивые, рассчитаны основные зарядовые, энергетические и геометрические характеристики в адсорбционных комплексах (АК). Из всех возможных вариантов выбрано несколько основных, которые характеризовались наибольшей глубиной минимума энергии адсорбции, так как чем меньше энергии тратится на образование связи сорбат – сорбент, тем прочнее идет образование АК. Представлены схемы взаимодействия для рассматриваемых групп АК. Выделены активные центры воздействия эфедрина на клеточную мембрану. Установлено, что эфедрин наиболее активно взаимодействует и образует наиболее устойчивые АК с триглицеридом, что позволяет говорить об избирательном воздействии эфедрина на различные компоненты клеточной мембраны и прогнозировать его эффективность в качестве средства для уменьшения массы тела.

Ключевые слова: математическое моделирование, молекулярное взаимодействие, квантово-химические расчеты, молекулярное моделирование, модели взаимодействия, схема взаимодействия, эфедрин, компоненты мембраны, активные центры воздействия.

QUANTUM-CHEMICAL MODELLING OF PROCESSES OF INFLUENCE OF EPHEDRINE ON STRUCTURAL COMPONENTS OF THE CELLULAR MEMBRANE

Sirotin Andrey N., Student, Astrakhan State University, 20a Tatishchev str., Astrakhan, 414056, Russia, e-mail: asirotin@mail.ru.

Zharkikh Lesya I., Ph. D., Astrakhan State University, 20a Tatishchev str., Astrakhan, 414056, Russia, e-mail: lesy_g@mail.ru.