

DOI: 10.25205/978-5-4437-1691-6-70

**МОДЕЛИРОВАНИЕ СТРУКТУРЫ АЛЬБУМИНА,
ИМПРИНТИРОВАННОГО ПИЩЕВЫМ ТОКСИНОМ***

MODELLING OF ALBUMIN STRUCTURE IMPRINTED WITH FOODBORNE TOXIN

П. М. Ильичева, П. С. Пиденко, Н. А. Бурмистрова

Саратовский государственный университет им. Н.Г. Чернышевского

P. M. Ilicheva, P. S. Pidenko, N. A. Burmistrova

Saratov State University

✉ ilichevapm@gmail.com

Аннотация

В данной работе методами молекулярной динамики и молекулярного докинга проведено моделирование структуры бычьего сывороточного альбумина в присутствии молекул токсина пищевого происхождения, зearаленона, в условиях синтеза импринтированных белков. Изучены фундаментальные основы образования импринтированных белков и разработан комплекс рекомендаций для их рационального проектирования.

Abstract

In this work molecular dynamics and molecular docking were carried out to simulate the structure of bovine serum albumin (BSA) in the presence of foodborne toxin zearalenone molecules under conditions of imprinted proteins synthesis. The fundamental principles of the formation of imprinted proteins have been studied and insights into the rational design for IPs were submitted.

Создание импринтированных белков (ИБ) как синтетической альтернативы природным системам распознавания является важной задачей биотехнологии. Импринтинг белка предоставляет важную информацию, которую можно использовать для контроля различных функций нативных белков. Другими словами, этот метод предлагает универсальную платформу для различных биомедицинских и экологических приложений [1]. Например, ИБ на основе альбумина успешно использовались в качестве элемента распознавания в иммуноферментном анализе для определения токсинов пищевого происхождения [2, 3]. Однако имеющиеся знания по теоретическому изучению ИБ как систем распознавания ограничены. В связи с этим актуальным является моделирование структуры ИБ для понимания механизма их образования и повышения эффективности и безопасности производимой продукции.

В рамках работы проведено моделирование структуры бычьего сывороточного альбумина в присутствии молекул пищевого токсина, зearаленона, в условиях синтеза ИБ методами молекулярного докинга и молекулярной динамики. Мы использовали комплексный и фундаментальный подход к импринтингу белков, используя комбинацию экспериментальных и теоретических методов, которые дают более исчерпывающую характеристику структурных изменений в белковой матрице.

Литература

1. Xu J., Miao H., Wang J. and Pan G. Molecularly imprinted synthetic antibodies: from chemical design to biomedical applications // *Small*. 2020. Vol. 16. P. 1906644.
2. Pidenko P., Zhang H., Lenain, P. et al. Imprinted proteins as a receptor for detection of zearalenone // *Anal. Chim. Acta*. 2018. Vol. 1040. P. 99–104.
3. Beloglazova N., Lenain P., Tessier M. et al. Bioimprinting for multiplex luminescent detection of deoxynivalenol and zearalenone // *Talanta*. 2019. Vol. 192. P. 169–174.

* Исследование выполнено при поддержке гранта РФФ (№ 22-16-00102).
© П. М. Ильичева, П. С. Пиденко, Н. А. Бурмистрова, 2024