

ИЗУЧЕНИЕ ДЕЙСТВИЯ ИОНОВ ГАЛЛИЯ НА ЖЕЛЕЗОЗАВИСИМЫЕ ПРОЦЕССЫ МИКРООРГАНИЗМОВ

Б. А. Судаков (Университет НАН Беларуси)

Науч. рук. Я. В. Диченко,

канд. хим. наук, доцент

В настоящее время существует огромное количество больничных инфекций, однако самыми опасными из них являются те, что вызываются синегнойной палочкой (*Pseudomonas aeruginosa*) и золотистым стафилококком (*Staphylococcus aureus*) из-за их способности образовывать биопленки, непроницаемые для антибиотиков. По причине постоянного роста адаптивности бактерий к бактерицидным средствам встает вопрос о создании нового поколения препаратов, направленных на подавление столь устойчивых организмов.

Железо является важнейшим элементом для всех микроорганизмов. В ответ на инвазию в организме человека вырабатываются механизмы понижения уровня свободного железа в тканях. В ответ на эти механизмы бактерии создали механизмы захвата железа, высвобождая его из железосодержащих или железозависимых белков и ферментов (трансферрин, ферритин, супероксиддисмутаза, каталаза, аконитаза) посредством сидерофоров или других механизмов. Ионы галлия являются миметиками железа, однако ионы галлия не могут полностью конкурировать с нативным белком за связывание в его активном центре, поскольку константы ассоциации галлия при физиологическом pH являются вторыми после констант для иона железа: $\log K_1 = 19,75$ и $\log K_2 = 18,80$, что говорит о конкуренции за связывание [1, с. 822].

Для выполнения исследования была запущена молекулярная динамика для ферритина, трансферрина и Fe-супероксиддисмутазы в пакете программ GROMACS, где атом железа в составе первичного кода белков был замещен на атом галлия. Результатом молекулярной динамики стало нарушение конформации всех белков выборки. Нарушения в структуре приводят к неспособности нормально функционировать, что приводит к гибели. Данные подтверждаются *in vitro*, через посев бактериальной культуры сенной палочки и добавления раствора нитрата галлия (III) к проросшим бактериям. Результатом суточного воздействия стала частичная гибель колоний. Это согласуется с данными о конкуренции за связывание.

Литература

1. Langodegard, M. Determination of gallium in soil by slurry-sampling graphite-furnace atomic-absorption spectrometry / M. Langodegard, G. Wibetoe // Analytical and bioanalytical chemistry. – 2002. – № 373. – С. 820-826.