

Ивашков С.С.

**КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКИЙ АНАЛИЗ СТРОЕНИЯ И СПЕКТРАЛЬНЫЕ
СВОЙСТВА Р ТАУ БЕЛКА И ИОНОВ КАЛЬЦИЯ**

Научный руководитель: канд. мед. наук, доц. Глинник С.В.

Кафедра общей химии

Белорусский государственный медицинский университет, г. Минск

Актуальность. Изучение процессов кальцификации нейронов на квантовом уровне при болезни Альцгеймера позволяет понять механизмы заболевания на фундаментальном уровне и способствует открытию новых методов в терапии. В данной статье рассмотрена кальциевая концепция механизма развития болезни Альцгеймера, описаны результаты квантово-химических расчетов для комплекса р Тау белка и ионов кальция.

Цель: исследовать квантово-молекулярные механизмы влияния комплекс р Тау белка с кальцием при болезни Альцгеймера и обосновать их ключевую роль в развитии синаптической дисфункции. Провести квантово-химический анализ строения и изучить спектральные свойства р Тау белка и ионов кальция

Материалы и методы. При исследовании были использованы следующие базы данных: PDB, PubMed, Materials Project. Для исследования квантовых эффектов в молекулах применялись программы GausView, Gaussian09W.

Результаты и их обсуждение. Кальцификация мозга у пациентов с болезнью Альцгеймера была описана многими исследователями в течение последних десятков лет. Накопление р Тау (патологической формы нормального белка Тау) является ключевым признаком болезни Альцгеймера, болезни Пика и ряда других таупатий, приводя к потере способности нейронов функционировать. Исследования свидетельствуют о том, что нейроны, восприимчивые к тау-патологии, демонстрируют признаки повышенного уровня кальция в клетке. На основании этого была разработана кальциевая концепция развития болезни Альцгеймера.

В данной работе проводился расчет энергии комплекса р Тау белка и ионов кальция по методу Хатри-Фока. В основе метода лежит приближенное решение уравнения Шрёдингера для многоэлектронных систем, сводящее сложную многосоставную задачу к совокупности простых задач. Каждый электрон рассматривается движущимся в усредненном самосогласованном поле, создаваемом ядром и остальными электронами. Вычисленные с помощью метода Хатри – Фока электронные плотности атомов являются достаточно точными потому, что метод не учитывает корреляцию электронов, но при этом учитывает принцип Паули, что делает его лучшим приближением для решения волновой функции.

Электронная энергия комплекса составила -1763,68 Хатри, что характеризует ее как систему среднего размера. Дипольный момент равен 17.91 Дебай (Дб), что свидетельствует о сильной полярности комплекса. Наличие только положительных колебательных частот (0–422 см⁻¹) свидетельствует о том, что молекула находится в состоянии локального минимума, на поверхности потенциальной энергии. Это равновесная, кинетически устойчивая структура. Спектр в представленном диапазоне типичен для гибких молекулярных каркасов слабых не ковалентных взаимодействий, так как преобладают низкочастотные колебания.

Выводы. Результаты *in silico* подтвердили, что ионы кальция влияют на развитие патологии Тау белка, что, согласно литературным данным последних лет, может приводить к развитию болезни Альцгеймера.