

КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ БАКТЕРИАЛЬНОГО ЭНДОТОКСИНА С ПОЛИКАТИОНОМ-ХИТОЗАНОМ

Заводинский Виктор Григорьевич,^{1*} Гниденко Александр Анатольевич,¹
Давыдова Виктория Николаевна² и Ермак Ирина Михайловна²⁺

¹ Институт материаловедения ХНЦ ДВО РАН. Ул. Тихоокеанская, 153. Хабаровск 680042. Россия.

² Тихоокеанский институт биоорганической химии ДВО РАН. Пр-т 100-летия Владивостоку, 159.
г. Владивосток 690022. Россия. Тел./факс: (4232) 314-050. E-mail: iren@piboc.dvo.ru

*Ведущий направление; ⁺Поддерживающий переписку

Ключевые слова: липополисахариды, эндотоксин, хитозан, образование комплекса, квантово-химическое моделирование, метод АМ1.

Резюме

Взаимодействие бактериального эндотоксина (липополисахарида - ЛПС) с природным поликатионом - хитозаном (ХТ) исследовано с помощью компьютерного моделирования. Для теоретического исследования был использован квантово-химический полуэмпирический метод АМ1, а экспериментального - спектрофотометрический метод. Были изучены несколько конфигураций возможного связывания ЛПС и ХТ.