

Материалы XVI международной  
научной конференции

**АКТУАЛЬНЫЕ ВОПРОСЫ  
БИОЛОГИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ  
И ХИМИИ**

**БФФХ - 2021**



**СЕВАСТОПОЛЬСКИЙ  
ГОСУДАРСТВЕННЫЙ  
УНИВЕРСИТЕТ**

[www.sevbppc.ru](http://www.sevbppc.ru)

МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ  
РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ

СЕВАСТОПОЛЬСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ

МОСКОВСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ  
ИМЕНИ М.В. ЛОМОНОСОВА

**АКТУАЛЬНЫЕ ВОПРОСЫ  
БИОЛОГИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ И ХИМИИ**

**БФФХ – 2021**

*Материалы XVI международной научной конференции  
г. Севастополь, 13-17 сентября 2021 г.*

**MODERN TRENDS IN BIOLOGICAL PHYSICS AND CHEMISTRY  
BPPC – 2021**

*Proceedings of XVI International Scientific Conference  
Sevastopol, 13-17 of September, 2021*

Севастополь 2021

УДК 577.113:541.49

ББК

28.07

28.07 Актуальные вопросы биологической физики и химии. БФФХ-2021: материалы XVI международной научной конференции, г. Севастополь, 13-17 сентября 2021 г. – Севастополь, 2021. – 236 с.

Сборник материалов составлен по итогам XVI международной научной конференции «Актуальные вопросы биологической физики и химии. БФФХ-2021», организованной совместно Севастопольским государственным университетом и Московским государственным университетом имени М.В. Ломоносова с 13 по 17 сентября 2021 г. в Севастополе.

В сборнике приведены материалы научных работ, посвященных актуальным вопросам общей и молекулярной биофизики, нанобиофизики, биофизики клетки, биофизики сложных систем, проблемам современной биоорганической, биофизической и медицинской химии.

Издание рассчитано на научных работников, аспирантов, студентов.

Modern Trends in Biological Physics and Chemistry. BPPC-2021: proceedings of XVI International Scientific Conference, Sevastopol, 13-17 of September, 2021. – Sevastopol, 2021. – 236 p.

The proceedings is a compilation of the reports of XVI International scientific conference "Modern Trends in Biological Physics and Chemistry. BPPC-2021", organized by Sevastopol State University and Lomonosov Moscow State University 13-17 of September, 2021 in Sevastopol.

The proceedings contains materials of research papers, devoted to modern trends in general and molecular biophysics, nanobiophysics, cell biophysics, complex systems biophysics, problems of modern biological, biophysical and medicinal chemistry.

The publication is intended for scientists, postgraduate, students.



**ПРОГРАММНЫЙ КОМИТЕТ:**

Евстигнеев Максим Павлович, проректор по научной и инновационной деятельности СевГУ, профессор, д.ф.-м.н. – сопредседатель;

Твердислов Всеволод Александрович, заведующий кафедрой биофизики физического факультета МГУ, профессор, д.ф.-м.н. – сопредседатель;

Артюхов Валерий Григорьевич, заведующий кафедрой, профессор, д.б.н. (Воронежский государственный университет, г. Воронеж);

Бержанский Владимир Наумович, заведующий кафедрой, д.ф.-м.н. (Крымский федеральный университет им. В.И. Вернадского, г. Симферополь);

Заседателев Александр Сергеевич, профессор (Институт молекулярной биологии РАН, г. Москва);

Нечипуренко Юрий Дмитриевич, д.ф.-м.н., с.н.с. (Институт молекулярной биологии РАН, г. Москва);

Ризниченко Галина Юрьевна, профессор (Московский государственный университет, г. Москва);

Рууге Энно Куставич, профессор (ФГБУ «НМИЦ Кардиологии» Минздрава России, г. Москва);

Тихонов Александр Николаевич, профессор (Московский государственный университет, г. Москва);

Эрнандес Сантьяго Адриан Аполинар, д-р философии (Автономный университет, г. Пуэбла, Мексика);

Яковенко Леонид Владимирович, профессор (Московский государственный университет, г. Москва).

**PROGRAM COMMITTEE:**

Evstigneev M.P., Vice-rector for Scientific and Innovation Activity, Professor, Ph.D. (Sevastopol State University) – co-Chairman;

Tverdislov V.A., Head of the Department of Biophysics, Faculty of Physics, Professor, Ph.D. (Moscow State University) – co-Chairman;

Artyuhov V.G., Head of Department, Professor, Ph.D. (Voronezh State University, Voronezh);

Berzhansky V.N., Head of Department (V.I. Vernadsky Crimean Federal University, Simferopol);

Hernandez Santiago A.A., Ph.D. (Autonomous University, Puebla, Mexico);

Nechipurenko Yu.D., Ph.D., Senior Researcher (Institute of Molecular Biology, Russian Academy of Sciences, Moscow);

Riznichenko G.Yu., Professor, Ph.D. (Moscow State University);

Ruuge E.K., Professor, Ph.D. (Moscow State University);

Tikhonov A.N., Professor, Ph.D. (Moscow State University);

Yakovenko L.V., Professor, Ph.D. (Moscow State University);

Zasedatelev A.S., Professor, (Institute of Molecular Biology, Russian Academy of Sciences, Moscow).

На графике зависимости давления и модуля сжатия от удельной площади можно видеть 3-4 участка, которые соответствуют состояниям молекул с плотной упаковкой. Диапазоны удельных площадей, на которых формируются эти состояния,  $A = 0,58-0,64$ ;  $0,78-0,85$ ;  $0,98-1,10$  нм<sup>2</sup>. Видно, что самое плотное состояние формируется при минимальных значениях удельных площадей  $A = 0,58-0,64$  нм<sup>2</sup>, для которых модуль сжатия максимален  $C^{-1} = 97$  мН/м, а рассчитанное  $A_0$  в этом состоянии имеет величину около  $0,90$  нм<sup>2</sup>. Полученные значения для этого состояния имеют величины модуля сжатия меньше, чем для типичных фосфолипидов или классических ПАВ. Кроме того, по приведенным зависимостям видно, что существуют как минимум еще три состояния, в которых молекулы монослоя упаковываются в плотные структуры. На этих участках модуль сжатия имеет локальные максимумы, свидетельствующие о повышении механической прочности монослоя и его высокой стабильности.

1. Qassime M.M. et al. A studying of subphase temperature and dissolved ascorbic acid concentration influence on the process of Langmuir monolayer formation // J. Phys.: Conf. Ser., 2018, vol. 1124, p. 031010.

## IMPLEMENTATION OF SUPERVISED LEARNING ALGORITHMS FOR PREDICTING OF COUPLED CHEMICAL OSCILLATORS

**Zuniga Mora A., Arzola Flores J.A., Vidal Robles E., Hernandez Santiago A.A., Rojas Rodriguez J.F.**

Meritorious Autonomous University of Puebla, Puebla, Mexico, *jesus.arzola@correo.buap.mx*

It is well known that physiological processes are the consequence of an intricate network of chemical reactions [1]. Therefore, it is difficult to understand in-depth the complex dynamics that underlie these physiological processes, the way in which they are coupled and how there are mismatches in their coupling. They can give rise to various pathologies [1].

Today, thanks to the development of artificial intelligence, it is possible to train theoretical-computational algorithms to provide them with a certain learning capacity, in order to contribute to the diagnosis of various pathologies [2]. The use of these algorithms could make it possible to understand the complex dynamics that underlie the synchronization phenomena between physiological processes [2].

A new methodology for the prediction of coupled chemical oscillators is proposed. These oscillators emulate the dynamics of different chemical reactions related to physiological processes. Here we propose the linear bidirectional coupling between three chemical oscillators. The numerical solution of the coupled models allowed us to obtain the recurrence diagrams [4] of said coupled oscillators, which were used to train a multilayer perceptron neural network (MLP) [5] to predict the type of coupled oscillators. Finally, the results obtained by the MLP were compared with those obtained by one logistic regression model. In both models, it is possible to obtain accuracy in the classification of coupled oscillators above 90%. These results open the possibility of extending our methodology to the experimental field to contribute to the diagnosis of diseases related to synchronization and desynchronization processes of different physiological.

1. Costa L.D.F., Rodrigues F.A., Cristino A.S. Complex networks: the key to systems biology // Genetics and Molecular Biology, 2008, vol. 31 (3), pp. 591-601.

2. Ishak W.H.W., Siraj F. Artificial intelligence in medical application: An exploration // Health Informatics Europe Journal, 2002, vol. 16.

3. Arzola-Flores J.A., Vidal-Robles E., Rojas-Rodríguez J.F. et al. Sincronización en sistemas químicos // Revista Mexicana de Ingeniería Química, 2017, vol. 16 (3), pp. 883-898

4. Arzola-Flores J.A., García E.G., Rodríguez J.R. et al. Spatial and temporal dynamics of Belousov-Zhabotinsky reaction: A STEM approach // Revista Mexicana de Física E, 2020, vol. 17, pp. 178-190.

5. Arzola-Flores J.A., Rojas Rodríguez J.F., Vidal Robles E. Modified Oregonator: an Approach from the Complex Networks Theory // Revista mexicana de ingeniería biomédica, 2020, vol. 41 (3).

## ОБЛАСТИ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ОРТОКРЕМНИЕВОЙ КИСЛОТЫ И СИЛИКАТЕИНА- $\alpha$ *T. AURANTIUM*

**Interaction Regions of Orthosilicic Acid and Silicatein- $\alpha$  from *T. Aurantium***

**Изотова Е.Д., Акберова Н.И.**

Казанский (Приволжский) федеральный университет, г. Казань, РФ, *izotova.e.d@gmail.com*

Технология управляемого синтеза кремнеземных структур является перспективной и в последнее время широко изучаемой областью биофизики, биохимии и молекулярной биологии [1].

Губки родов *Demospongiae* и *Hexactinellid* способны образовывать кварцевоподобные структуры - спикулы из растворенных кремниевых кислот при нормальном атмосферном давлении и температуре, в отличие от методов химического синтеза. Основную роль в процессе спикулогенеза отводят ферменту – силикатеину- $\alpha$  [1].

Предполагается, что силикатеин- $\alpha$  выполняет 3 функции, иницируя и направляя спикулогенез: первая – каталитическая, а вторая структурообразующая, третья – белок является поверхностью для адгезии кремниевых кислот.

Ранее продемонстрировано, что каталитической активностью могут обладать аминокислотные остатки Gln19, Ser25, His164. В то время как области адгезии кремниевых кислот на поверхности силикатеина- $\alpha$  остаются недостаточно изученными. Поэтому целью данной работы было выявить области взаимодействия молекул кремниевых кислот со структурой силикатеина- $\alpha$  методом молекулярного докинга.

В базе данных RCSB PDB представлена лишь одна модель структуры белка - силикатеина- $\alpha$ , выделенный из организма *T. Aurantium* (код 6ZQ3) [2]. Белок 6ZQ3 - это структура просиликатеина, имеющий как функциональный так и ингибиторный домен цистеиновых пептидаз C1, подсемейства C1A (семейство папаина). Молекула ортокремниевой кислоты была оптимизирована в программе PCGAMESS/Firefly методом теории функционала плотности с функционал X3LYP в базисе 6-31G(d)/6-311++G(2d,p). Молекулярный докинг проведен с помощью онлайн сервисов BSP-SLIM и ROSIE.

Обе программы показали сопоставимые результаты (рис. 1).

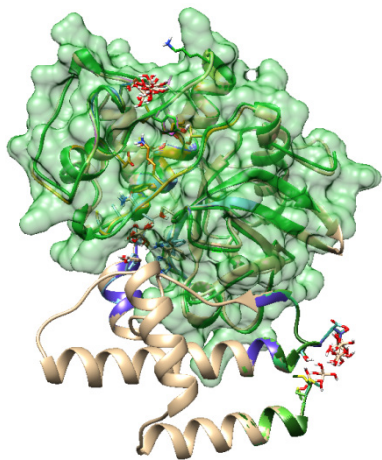


Рисунок 1. Области взаимодействия молекулы ортокремниевой кислоты с силикатеином- $\alpha$

По данным молекулярного докинга можно выделить три области взаимодействия молекулы ортокремниевой кислоты и силикатеина- $\alpha$ : первая - область вблизи активного центра, затрагивающая аминокислотные остатки Gln19, Ser25, His164, Trp186; вторая область взаимодействия располагается с другой стороны белка и включает следующие аминокислотные остатки: Lys17, Lys44, Thr14, Thr46, Met31, Tyr47, Glu35, Glu50, Asp85, Ala27, Phe28.

Первая и вторая области взаимодействия располагаются на разных сторонах молекулы белка, разделенные  $\alpha$ -спиралями и  $\beta$ -складками. Во внутреннюю полость этих структур так же происходит докирование молекулы ортокремниевой кислоты.

Третьей областью взаимодействия является фрагмент структуры ингибиторного домена C1. Аминокислотные остатки которого являются: Met1, Asp68, Thr69. Взаимодействие молекул ортокремниевой кислоты с ингибиторным доменом C1 может носить регуляторный характер.

По результатам исследования можно предположить, что зрелый силикатеин- $\alpha$  имеет 2 области связывания с кремниевыми кислотами: первая располагается в области активного центра, вторая – с противоположной стороны.

1. Schroder H.C., Grebenjuk V.A., Wang X., Muller W.E. Hierarchical architecture of sponge spicules biocatalytic and structure-directing activity of silicatein proteins as model for bioinspired applications // *Bioinspiration & Biomimetics*, 2016, vol. 11, p. 041002. doi: 10.1088/1748-3190/11/041002

2. Görlich S., Samuel A.J., Best R.J. et al. Natural hybrid silica/protein superstructure at atomic resolution // *PNAS*, 2020, vol. 117, no. 49, pp. 31088-31093. doi: 10.1073/pnas.2019140117

## СТРУКТУРНАЯ ОРГАНИЗАЦИЯ МОЛЕКУЛЫ GLY-PRO-ARG-PRO Structural Organization of the Gly-Pro-Arg-Pro Molecule

Исмаилова Л.И., Аббаслы Р.М., Ахмедов Н.А.

Бакинский государственный университет, Институт физических проблем, г. Баку, Азербайджан,  
lara.ismailova.52@mail.ru

В настоящее время активно исследуется роль регуляторных пептидов в жизни и деятельности организмов. Выяснение структурно-функциональных свойств этих пептидов имеет большое прикладное значение в медицине и фармакологии. При создании новых лекарственных препаратов исследователи все чаще обращаются к использованию собственных резервов человеческого организма. Единый механизм регуляции функций объединяет нервную, эндокринную и иммунную системы, управляющие жизнедеятельностью организма [1].