

## ИССЛЕДОВАНИЕ МЕХАНИЗМА ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ БАКТЕРИИ *BACILLUS SUBTILIS* С ПОВЕРХНОСТЬЮ КРЕМНИЯ ПОСРЕДСТВОМ КВАНТОВО-МЕХАНИЧЕСКИХ МЕТОДОВ МОДЕЛИРОВАНИЯ

В.А. БУРКО<sup>1</sup>, Я.В. ДОЛГАЯ<sup>2</sup>, В.Р. СТЕМПИЦКИЙ<sup>1</sup>, В.В. БАРКАЛИН<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники  
ул. П. Бровки, 6, г. Минск, 220013, Республика Беларусь  
nil44@bsuir.by

<sup>2</sup>Белорусский национальный технический университет  
пр-т Независимости, 65, г. Минск, 220013, Республика Беларусь  
douhaja\_grid@bntu.by

Существенной проблемой эксплуатации биологических препаратов является необходимость соблюдения строгих условий хранения. Для решения этой проблемы предложено использовать пористые материалы в качестве «контейнера» для осаждения и хранения бактерий, такие как пористый кремний. В работе представлены результаты исследований механизмов взаимодействия бактерии *Bacillus subtilis* с поверхностью кремния методом квантовой механики.

*Ключевые слова:* бактерия *Bacillus subtilis*, биопестициды, пористый кремний, метод квантовой механики.

Преимущества пористых материалов заключаются в том, что условия в поре можно считать постоянными, и бактерии, находящиеся в такой поре изолированы от воздействий окружающей среды, что позволяет продлевать сроки хранения бактерий и замедлить ее ферментативный процесс.

Бактерии *Bacillus subtilis* являются грамположительными, спорообразующими, аэробными бактериями, представителями рода бациллы (*Bacillus*). В работе использовался штамм бактерии БИМ В-439Д, выделенный в лаборатории средств биологического контроля Института микробиологии НАН Беларуси. Морфологические признаки: вегетативные клетки культуры представляют собой палочки бациллярной формы размером  $0,6-0,7 \times 1,0-1,3$  мкм с округлыми концами. Экспериментальные исследования показали: внесение в питательную среду порошкообразного пористого кремния в концентрациях 0,001-0,1% приводит к увеличению концентрации клеток бактерий на 32-56% и спор – на 38-88%, не оказывая влияния на их антимикробную активность; при использовании пористых материалов в качестве носителей для посевного материала, концентрация спор полученного указанным способом биопрепарата составляет  $1,3 \times 10^9$ /мл, что на 32% выше, чем с обычным посевным материалом.

Для теоретического исследования механизма взаимодействия бактерии *B. subtilis* рассматривается строение клеточной стенки грамположительных бактерий, состоящей главным образом из цепочек пептидогликана (рис. 1). Поскольку слой пептидогликана расположен таким образом, что в сторону подложки будут направлены чередующиеся N-ацетилмурамовая кислота и N-ацетилглюкозамин, то можно ограничиться только соответствующими фрагментами, а так как части фрагментов, которые взаимодействуют с кремнием этих двух молекул совпадают, поэтому для дальнейшего исследования выбран N-ацетилглюкозамин. Анализируя структуру этой молекулы важно обратить внимание на двойную связь кислорода с углеродом. Известно, что вторая связь двойной

связи энергетически более слабая, поэтому она может быть разорвана. Учитывая высокую химическую активность кислорода, вполне вероятно, что разорванная связь кислорода образует новую связь.

Рассмотрены два механизма образования новой связи кислорода с подложкой: C-O-H-Si и C-O-Si (рис. 2), причем в первом случае вероятно образование водородной связи. Вычисления проводились в программе NWChem методом SCF (теория самосогласованного поля) [1-3]. Для атомов, участвующих во взаимодействиях использовался базис 6-31G\*, для остальных – 3-21G. Результаты вычислений показали, что при взаимодействии клеточной фрагмента стенки с поверхностью кремния по механизму C-O-Si, как и предсказывалось, может образовываться ковалентная связь Si-O, длиной ~ 0.17 нм. Взаимодействие по механизму C-O-H-Si не приводит ни к образованию ковалентной связи, ни к образованию водородной связи. Из полученных результатов можно сделать вывод, что бактерия будет иммобилизоваться посредством образования химических связей на кремниевой подложке, поверхность которой очищена от водорода.

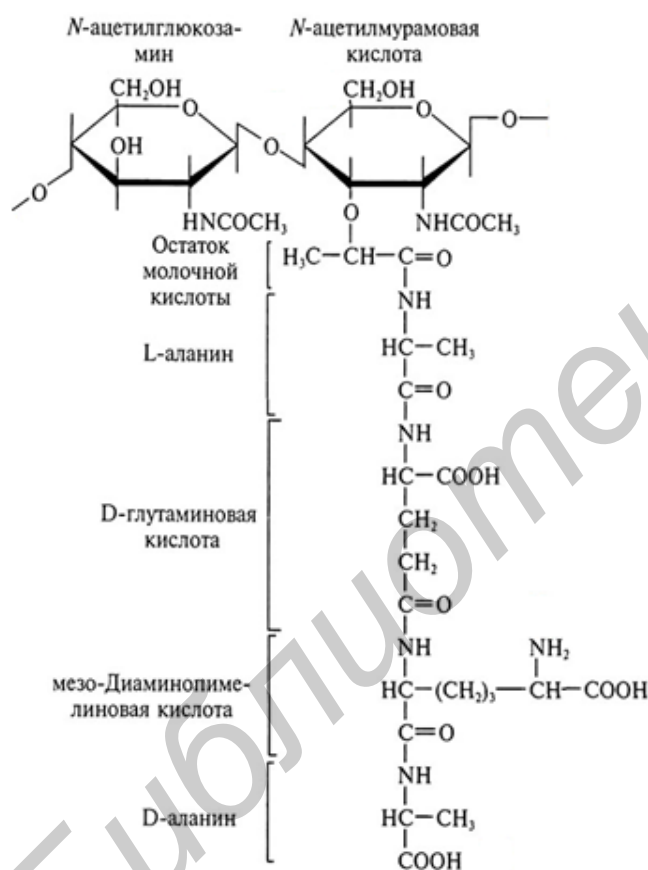


Рис. 1. Структура молекулы муреина грамположительных бактерий

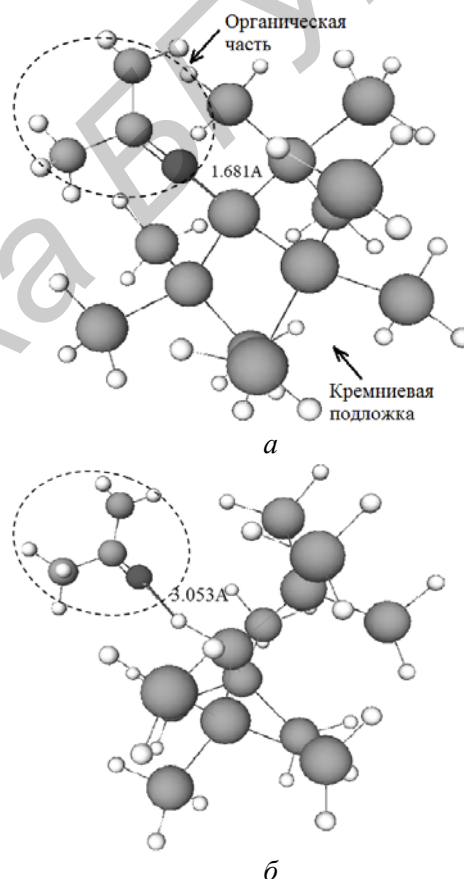


Рис. 2. Механизмы взаимодействия: а: C-O-Si; б: C-O-H-Si

#### Список литературы

1. NWChem Site [Electronic resource]. – Mode of access: <http://www.nwchem-sw.org>. – Date of access: 4.01.2014.
2. Valiev M. [et al.] // Comput. Phys. Commun. 2010. Vol. 181. P. 1477-1489.
3. Wong A.T., Harrison R.J. // J. Comp. Chem. 1995. Vol. 16. P. 1291-1300.