

**МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ РЕСПУБЛИКИ БЕЛАРУСЬ
БЕЛОРУССКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
ХИМИЧЕСКИЙ ФАКУЛЬТЕТ
Кафедра аналитической химии**

Колчина
Анна Олеговна

**Синтез и определение свойств некоторых флуоресцирующих
производных резорцина экспериментальными и компьютерными
методами**

Дипломная работа

Научный руководитель:
Кандидат химических наук
Ведущий научный сотрудник
_____ Фалетров Я.В.

Рецензент:
Старший преподаватель
Кандидат химических наук
_____ Белов Д.А.

Допущен к защите
«__» _____ 2024 г.
Зав. кафедрой аналитической химии
Доктор химических наук
_____ М.Ф. Заяц

Минск, 2024

СПИСОК УСЛОВНЫХ ОБОЗНАЧЕНИЙ

ЖХ-МС – Жидкостная хроматография масс-спектрометрия

ВЭЖХ – Высокоэффективная жидкостная хроматография

ТСХ – Тонкослойная хроматография

Для синтеза – более 99% чистоты

МС – Масс-спектрометрия

ЯМР – Ядерный магнитный резонанс

УФ-В – Ультрафиолетовое видение

ФК – Флуоресцентная спектроскопия

Resac – 6-гидрокси-9-алкил-3H-ксантен-3

ФФ – Флуорофор

СП – Спектрофлуориметрия

ДМСО – диметилсульфоксид

PDB – база данных белков

РЕФЕРАТ

Дипломная работа: 50 с., 37 рис., 24 источника.

Ключевые слова: флуоресцеин, флуоресценция, спектр, Resac, микробиологический анализ, дрожжи, молекулярный докинг, цитохром P450, тонкослойная хроматография, спектрофото- и спектрофлуориметрии.

Проведена апробация методик получения флуоресцирующих красителей, относящихся к группе ксантовых красителей. Полученная синтетическая смесь проанализирована с помощью ТСХ, жидкостной хроматографией с МС, частично спектрофото- и спектрофлуориметрии, частично ЯМР. Хроматографическая подвижность согласуется с теоретическим представлением о структуре соединения. Получение 6-гидрокси-9-алкил-3н-ксантена-3 подтверждено физико-химическими наблюдениями, хроматографическим анализом и данными масс-спектрометрии, соответственно. Методом флуоресцентной микроскопии показано, что дрожжи *Yarrowia lipolytica* поглощают краситель Resac. In silico с использованием молекулярного докинга показано, что среди белков микобактерий аффинное связывание Resac возможно с белками *Bacillus megaterium* и *Streptomyces* (с цитохромами P450: NasF5053 mutant F387G и CYP106A1) с рассчитанными программой Autodock Vina энергиями связывания в диапазоне от -12 до -9 ккал/моль.

_____ (подпись студента)

РЭФЕРАТ

Дыпломная праца: 50 с., 37 мал., 24 крыніцы.

Ключавыя словы: флуарэсцэін, флуарэсцэнцыя, спектр, Resac, мікрабіялагічны аналіз, дрожджы, малекулярны докінг, цытахром P450, тонкапластовая храматаграфія, спектрафота- і спектрафлуарыметрыі.

Праведзена апрабаваная метадаў атрымання флуарэсцыруючых фарбавальнікаў, якія адносяцца да групы ксантэнавых фарбавальнікаў. Атрыманая сінтэтычная сумесь прааналізавана з дапамогай ТСХ, храматаграфіі з МС, часткова спектрафота- і спектрафлуарыметрыяй, часткова ЯМР. Храматаграфічная рухомасць супадае з тэарэтычным уяўленнем аб структуры злучэння. Атрыманне 6-гідраксі-9-алкіл-3-н-ксантэна-3 пацверджана фізіка-хімічнымі назіраннямі, храматаграфічным аналізам і данымі мас-спектраметрыі адпаведна. Метадам флуарэсцэнтнай мікраскапіі паказана, што дрожджы *Yarrowia lipolytica* паглынаюць фарбавальнік Resac. In silico з выкарыстаннем малекулярнага докінгу паказана, што сярод бялкоў мікабактэрыі афіннае звязванне Resac магчыма з бяжкамі *Bacillus megaterium* і *Streptomyces* (з цытахромамі P450: NasF5053 mutant F387G і CYP106A1) з разлічанымі праграмай Autodock Vina энергіямі звязвання ў дыяпазоне ад -12 да -9 ккал/моль.

_____ (подпіс студэнта)

ABSTRACT

Degree paper: 50 p., 37 ill., 24 sources.

Keywords: fluorescein, fluorescence, spectrum, Resac, microbiological analysis, yeast, molecular docking, cytochrome P450, thin-layer chromatography, spectrophotometry, and spectrofluorimetry.

Methods for obtaining fluorescent dyes belonging to the xanthene dye group were tested. The resulting synthetic mixture was analyzed using TLC, liquid chromatography-mass spectrometry (LC-MS), partially by spectrophotometry and spectrofluorimetry, and partially by NMR. The chromatographic mobility corresponds with the theoretical structural representation of the compound. The formation of 6-hydroxy-9-alkyl-3H-xanthene-3 was confirmed by physicochemical observations, chromatographic analysis, and mass spectrometry data, respectively. Fluorescent microscopy showed that the yeast *Yarrowia lipolytica* absorbs the dye Resac. In silico molecular docking demonstrated that among mycobacterial proteins, Resac has affine binding with proteins from *Bacillus megaterium* and Streptomycetaceae (with cytochromes P450: NasF5053 mutant F387G and CYP106A1) with binding energies calculated by Autodock Vina ranging from -12 to -9 kcal/mol.

_____ (student's signature)