

Современная наука и инновации.
2024. № 2 (46). С. 69-75.
Modern Science and Innovations.
2024;2(46):69-75.

ТЕХНОЛОГИЯ ПРОДОВОЛЬСТВЕННЫХ
ПРОДУКТОВ /
TECHNOLOGY OF FOOD PRODUCTS

Научная статья / Original article

УДК 546.23 + 004.94

<https://doi.org/10.37493/2307-910X.2024.2.7>

Зафар Абдулович Рехман

[Zafar A. Rekhman]^{1*},

Максим Александрович Пирогов

[Maxim A. Pirogov]²,

Александр Владимирович Серов

[Alexander V. Serov]³,

Ирина Михайловна Шевченко

[Irina M. Shevchenko]⁴,

Андрей Владимирович Блинов

[Andrey V. Blinov]⁵

**Квантово-химическое обоснование
обогащения молочных продуктов
селенсодержащими наноразмерными
системами**

**The Quantum chemical substantiation of
the enrichment of dairy products with
selenium-containing nanoscale systems**

^{1, 2, 3, 4, 5}Северо-Кавказский федеральный университет, г. Ставрополь, Россия /
North-Caucasus Federal University, Stavropol, Russia

*Автор, ответственный за переписку: Зафар Абдулович Рехман, zafrehman1027@gmail.com /
Corresponding author: Zafar A. Rekhman, zafrehman1027@gmail.com

Аннотация. В рамках данной работы с помощью метода квантово-химического моделирования в молекулярном редакторе IQmol с использованием программы QChem проведено квантово-химическое обоснование обогащения молочных продуктов селенсодержащими наноразмерными системами. Квантово-химическое моделирование проводилось посредством взаимодействия атома селена с различными функциональными группами аминокислот в C-терминальном участке к-казеина. В качестве основных анализируемых параметров рассматривали разницу полной энергии последовательности аминокислот в C-терминальном участке к-казеина с полной энергией взаимодействия атома селена с данной молекулярной структурой (ΔE), а также химическую жёсткость (η). В результате установлено, что обогащение молочных продуктов селенсодержащими наноразмерными системами является энергетически выгодным ($\Delta E \geq 2399,650$ ккал/моль) и химически стабильным ($0,053 \leq \eta \leq 0,070$ эВ), а оптимальной конфигурацией взаимодействия является соединение атома селена с C-терминальным участком к-казеина через гидроксильную группу серина, связанного пептидной связью с глутаминовой кислотой ($\Delta E = 2400,139$ ккал/моль, $\eta = 0,070$ эВ).

Ключевые слова: селенсодержащие наноразмерные системы, молочный продукт, к-казеин, квантово-химическое моделирование, серин

Для цитирования: Рехман З. А., Пирогов М. А., Серов А. В., Шевченко И. М., Блинов А. В. Квантово-химическое обоснование обогащения молочных продуктов селенсодержащими наноразмерными системами // Современная наука и инновации. 2024. № 2 (46). С. 69-75. <https://doi.org/10.37493/2307-910X.2024.2.7>

Финансирование: исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 23-16-00120, <https://rscf.ru/project/23-16-00120/>.

© Рехман З. А., Пирогов М. А., Серов А. В., Шевченко И. М., Блинов А. В., 2024

Abstract. Within the framework of this work, a quantum chemical substantiation of the enrichment of dairy products with selenium-containing nanoscale systems was carried out using the quantum chemical modeling method in the IQmol molecular editor using the QChem program. Quantum chemical modeling was carried out through the interaction of the selenium atom with various functional groups of amino acids in the C-terminal region of the K-casein. The main parameters analyzed were the difference in the total energy of the amino acid sequence in the C-terminal section of the K-casein with the total energy of the interaction of the selenium atom with a given molecular structure (ΔE), as well as chemical rigidity (η). As a result, it was found that the enrichment of dairy products with selenium-containing nanoscale systems is energetically advantageous ($\Delta E \geq 2399.650$ kcal/mol) and chemically stable ($0.053 \leq \eta \leq 0.070$ eV), and the optimal interaction configuration is the connection of a selenium atom with the C-terminal site of K-casein through the hydroxyl group of serine bound by a peptide bond with glutamic acid ($\Delta E = 2400.139$ kcal/mol, $\eta = 0.070$ eV).

Keywords: selenium-containing nanoscale systems, dairy product, k-casein, quantum chemical modeling, serine

Funding: the research was carried out at the expense of a grant from the Russian Science Foundation No. 23-16-00120, <https://rscf.ru/project/23-16-00120/>.

For citation: Rekhman ZA, Pirogov MA, Serov AV, Shevchenko IM, Blinov AV. The Quantum chemical substantiation of the enrichment of dairy products with selenium-containing nanoscale systems. *Modern Science and Innovations*. 2024;2(46):69-75. (In Russ.). <https://doi.org/10.37493/2307-910X.2024.2.7>

Введение. В настоящее время люди находятся под действием факторов, которые приводят к образованию свободных радикалов в клетках организма человека [1, 2]. Одним из следствий свободнорадикального окисления является появление онкологических заболеваний. В связи с этим, организм нуждается в дополнительной антиокислительной защите [3, 4].

Эссенциальный микроэлемент селен является известным антиоксидантом и входит в состав фермента глутатионпероксидазы, которая ингибирует образование свободных радикалов [5, 6]. Однако стоит отметить, что наноразмерная форма селена проявляет аналогичные свойства и является более предпочтительной, благодаря большей биодоступности и низкой токсичности [7], а также позволяет увеличить эффективность всасывания организмом данного соединения, повышая при этом ферментативный уровень защиты организма от окислительного стресса [8-10].

Согласно рекомендациям ГУ НИ питания РАМН, суточный уровень потребления селена составляет 70 мкг [11]. Мониторинг состояния здоровья населения показывает, что практически на всей территории РФ наблюдается дефицит данного микроэлемента [12]. Более 80 % населения России обеспечены селеном ниже оптимального уровня потребления [13]. Источником селена являются различные продукты животного и растительного происхождения – мясо, молоко, каши [14, 15]. Одним из актуальных способов борьбы с этим является обогащение селенсодержащими наноразмерными системами продуктов пищевой промышленности, в частности, молока и молочных продуктов [16, 17].

Таким образом, в целях прогнозирования механизмов взаимодействия наночастиц селена с компонентами молочного сырья (мицелл казеина) [18], было проведено компьютерное квантово-химическое моделирование.

Материалы и методы исследований. Экспериментальная часть. Квантово-химическое обоснование обогащения молочных продуктов селенсодержащими наноразмерными системами проводилось с помощью метода квантово-химического моделирования, в рамках которого рассматривалось взаимодействие атома селена с различными функциональными группами в последовательности аминокислот (серин, глутаминовая кислота, изолейцин, валин, глутаминовая кислота, пролин) в С-терминальном участке к-казеина. Моделирование проводилось в молекулярном редакторе IQmol. Расчёты проводились с помощью программы QChem на оборудовании центра обработки данных (Schneider Electric) ФГАОУ ВО Северо-Кавказского федерального университета. В качестве анализируемых данных рассматривали значения полной энергии

молекулярного комплекса (E), энергий высшей заселённой ($E_{НОМО}$) и низшей свободных молекулярных орбиталей ($E_{ЛУМО}$). На основе полученных данных были рассчитаны значения разницы полной энергии последовательности аминокислот в С-терминальном участке к-казеина с полной энергией взаимодействия атома селена с данной молекулярной структурой (ΔE), а также химическая жёсткость (η), характеризующая химическую стабильность соединения, рассчитываемая по формуле 1:

$$\eta = \frac{E_{ЛУМО} - E_{НОМО}}{2} \quad (1)$$

Результаты исследований и их обсуждение. В результате квантово-химического обоснования обогащения молочных продуктов селенсодержащими наноразмерными системами с помощью метода квантово-химического моделирования получены квантово-химические расчёты, представленные в таблице 1.

Таблица 1 – Результаты квантово-химического моделирования взаимодействия атома селена с С-терминальным участком к-казеина

Table 1 – Results of quantum chemical modeling of the interaction of the selenium atom with the C-terminal site of K-casein

Молекулярная система	Взаимодействие с к-казеином	E, ккал/моль	ΔE , ккал/моль	$E_{НОМО}$, эВ	$E_{ЛУМО}$, эВ	η , эВ
С-терминальный участок к-казеина	–	-2344,772	–	-0,179	-0,074	0,053
Атом селена + С-терминальный участок к-казеина	Через гидроксильную группу серина, связанного пептидной связью с глутаминовой кислотой	-4744,911	2400,139	-0,164	-0,025	0,070
	Через δ -карбоксильную группу глутаминовой кислоты, связанной пептидной связью с серином и изолейцином	-4744,857	2400,085	-0,178	-0,073	0,053
	Через δ -карбоксильную группу глутаминовой кислоты, связанной пептидной связью с валином и пролином	-4744,422	2399,650	-0,167	-0,062	0,053

Исходя из анализа полученных данных можно сделать вывод, что обогащение молочных продуктов селенсодержащими наноразмерными системами приводит к формированию энергетически выгодной ($\Delta E \geq 2399,650$ ккал/моль) и химически стабильной системы ($0,053 \leq \eta \leq 0,070$ эВ).

Оптимальной конфигурацией взаимодействия атома селена с С-терминальным участком к-казеина является взаимодействие через гидроксильную группу серина, связанного пептидной связью с глутаминовой кислотой, так как является наиболее энергетически выгодной ($\Delta E = 2400,139$ ккал/моль) и химически стабильной ($\eta = 0,070$ эВ превышает химическую жёсткость С-терминальным участком к-казеина $\eta = 0,053$ эВ), что свидетельствует о большей вероятности формирования взаимодействия атома селена с С-терминальным участком к-казеина именно через данную функциональную группу. На рисунках 1, 2 представлены модели молекулярных комплексов С-терминального участка к-казеина и взаимодействия атома селена с С-терминальным участком к-казеина через гидроксильную группу серина, связанного пептидной связью с глутаминовой кислотой, модели распределения электронной плотности и модели высшей заселённой и низшей свободной молекулярных орбиталей.

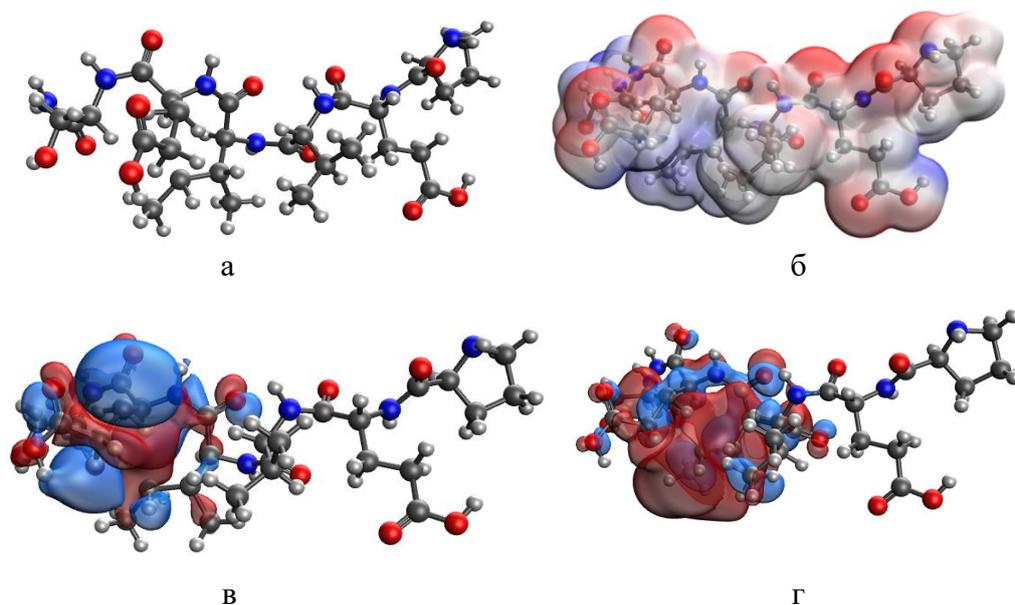


Рисунок 1 – Результаты моделирования С-терминального участка к-казеина
 а – модель молекулярного комплекса; б – распределение электронной плотности; в – высшая заселённая молекулярная орбиталь; г – низшая свободная молекулярная орбиталь (LUMO)
Figure 1 – Simulation results of the C-terminal section of k-casein
 a – model of the molecular complex; b – electron density distribution; c – highest populated molecular orbital; d – lowest free molecular orbital (LUMO)

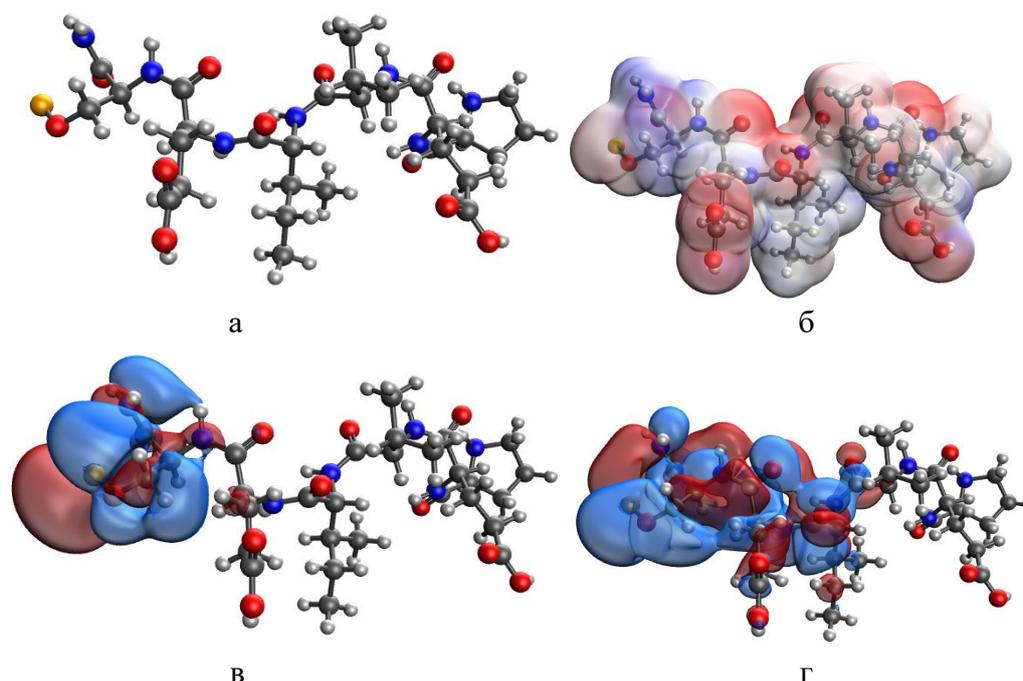


Рисунок 2 – Результаты моделирования взаимодействия атома селена с С-терминальным участком к-казеина через гидроксильную группу серина, связанного пептидной связью с глутаминовой кислотой
 а – модель молекулярного комплекса; б – распределение электронной плотности; в – высшая заселённая молекулярная орбиталь; г – низшая свободная молекулярная орбиталь (LUMO)
Figure 2 – Results of modeling the interaction of the selenium atom with the C-terminal site of k-casein through the hydroxyl group of serine bound by a peptide bond with glutamic acid
 a – model of the molecular complex; b – electron density distribution; c – the highest populated molecular orbital; d – the lowest free molecular orbital (LUMO)

При взаимодействии атома селена с С-терминальным участком к-казеина через гидроксильную группу серина, связанного пептидной связью с глутаминовой кислотой наблюдается смещение отрицательного заряда с молекулы глутаминовой кислоты к серину.

Также наблюдается изменение высшей заселённой и низшей свободной молекулярных орбиталей, что свидетельствует о формировании химического взаимодействия между атомом селена и С-терминального участка к-казеина.

Заключение. В результате работы с помощью квантово-химического моделирования было обосновано положительное влияние процесса обогащения молочных продуктов селенсодержащими наноразмерными системами. При взаимодействии молочного продукта с селенсодержащими наноразмерными системами наблюдается уменьшение полной энергии молекулярного комплекса и увеличение химической жёсткости, что свидетельствует о энергетической выгоде и химической стабильности данного взаимодействия.

ЛИТЕРАТУРА

1. Цейликман В. Э., Лукин А. А. Влияние окислительного стресса на организм человека // Международный научно-исследовательский журнал. 2022. № 3–1 (117). С. 206–211.
2. Martemucci G. et al. Free radical properties, source and targets, antioxidant consumption and health // Oxygen. 2022. Vol. 2. No. 2. P. 48–78.
3. Demirci-Cekic S. et al. Biomarkers of oxidative stress and antioxidant defense // Journal of pharmaceutical and biomedical analysis. 2022. Vol. 209. P. 114477.
4. Воробьева Е. Н. и др. Свободно-радикальное окисление и атеросклероз // Атеросклероз. 2022. Т. 6. № 2. С. 20–27.
5. Flohé L., Toppo S., Orian L. The glutathione peroxidase family: Discoveries and mechanism // Free Radical Biology and Medicine. 2022. Т. 187. С. 113–122.
6. Громова О. А. Селен – впечатляющие итоги и перспективы применения // Трудный пациент. 2007. Т. 5. № 14. С. 25–30.
7. Hadrup N., Ravn-Haren G. Toxicity of repeated oral intake of organic selenium, inorganic selenium, and selenium nanoparticles: A review // Journal of Trace Elements in Medicine and Biology. 2023. P. 127235.
8. Шурыгина И. А. и др. Селен в наноформе: токсичность и безопасность // Байкальский медицинский журнал. 2022. Т. 1. № 1. С. 24–32.
9. Pandiyan I. et al. Antioxidant, anti-inflammatory activity of Thymus vulgaris-mediated selenium nanoparticles: An in vitro study // Journal of Conservative Dentistry and Endodontics. 2022. Т. 25. № 3. С. 241–245.
10. Nayak V. et al. Potentialities of selenium nanoparticles in biomedical science // New Journal of Chemistry. 2021. Т. 45. № 6. С. 2849–2878.
11. Рекомендательные уровни потребления пищевых и биологически активных веществ: методические рекомендации. МР 2.3.1915-04. М.: ГУ НИИ питания, 2004. 22 с.
12. Дедов Д. В. Анемия: эпидемиология, клинико-патогенетические ассоциации, риск развития, дефицит селена, профилактика, селенсодержащие препараты // Врач. 2023. Т. 34. № 11. С. 63–66.
13. Мазилина А. Н. и др. Коррекция обеспеченности организма селеном как инструмент профилактической медицины // Здоровоохранение Российской Федерации. 2021. Т. 65. № 5. С. 447–453.
14. Елисеева Т. Селен (Se)–значение для организма и здоровья+ 30 лучших источников // Журнал здорового питания и диетологии. 2022. Т. 1. № 19. С. 55–64.
15. Chen N., Zhao C., Zhang T. Selenium transformation and selenium-rich foods // Food bioscience. 2021. Т. 40. С. 100875.
16. Храмов А. Г., Серов А. В., Тимченко В. П., Мирошниченко М. В. Новый биологически активный препарат на основе наночастиц селена // Вестник Северо-Кавказского государственного технического университета. 2010. № 4. С. 122–125.
17. Храмов А. Г. Нульвалентный селен в технологии молочных продуктов // Молочная промышленность. 2012. № 6. С. 78–79.

18. Храмов А. Г. Технологическая платформа КННС для функциональных продуктов // Переработка молока. 2015. № 5 (187). С. 54–57.

REFERENCES

1. Tseilikman VE, Lukin AA. On the effect of oxidative stress on the human body. *Meždunarodnyj naučno-issledovatel'skij žurnal (International Research Journal)*. 2022;3-1(117):206-211. (In Russ.).
2. Martemucci G et al. Free radical properties, source and targets, antioxidant consumption and health. *Oxygen*. 202;2(2):48-78.
3. Demirci-Cekic S et al. Biomarkers of oxidative stress and antioxidant defense. *Journal of pharmaceutical and biomedical analysis*. 2022;209:114477.
4. Vorobiova EN et al. Free-radical oxidation and atherosclerosis. *Ateroskleroz*. 2022;6(2):20-27. (In Russ.).
5. Flohé L, Toppo S, Orian L. The glutathione peroxidase family: Discoveries and mechanism. *Free Radical Biology and Medicine*. 2022;187:113-122.
6. Gromova OA. Selenium - impressive results and application prospects. *Trudnyi patsient = Difficult patient*. 2007;5(14):25-30. (In Russ.).
7. Hadrup N, Ravn-Haren G. Toxicity of repeated oral intake of organic selenium, inorganic selenium, and selenium nanoparticles: A review. *Journal of Trace Elements in Medicine and Biology*. 2023:127235.
8. Shurygina IA et al. Selenium in nanoform: Toxicity and safety. *Baikal Medical Journal*. 2022;1(1):24-32. (In Russ.).
9. Pandiyan I et al. Antioxidant, anti-inflammatory activity of *Thymus vulgaris*-mediated selenium nanoparticles: An: in vitro: study. *Journal of Conservative Dentistry and Endodontics*. 2022;25(3):241-245.
10. Nayak V et al. Potentialities of selenium nanoparticles in biomedical science // *New Journal of Chemistry*. 2021;45(6):2849-2878.
11. Recommended levels of consumption of food and biologically active substances: guidelines. MR 2.3.1915-04. Moscow: State Research Institute of Nutrition, 2004. 22 p. (In Russ.).
12. Dedov DV. Anemia: epidemiology, clinical-pathogenetic associations, risk of development, selenium deficiency, prevention, selenium-containing drugs. *Vrach (The Doctor)*. 2023;34(11):63-66. (In Russ.).
13. Mazilina AN et al. Correction of Selenium status as a tool for preventive medicine. *Health care of the Russian Federation*. Correction of Selenium status as a tool for preventive medicine. *Health care of the Russian Federation*. 2021;65(5):447-453. (In Russ.).
14. Eliseeva T. Selenium (Se) –Body & Health Importance + Top 30 Sources. *Journal of Healthy Nutrition and Dietetics*. 2022;1(19):55-64. (In Russ.).
15. Chen N, Zhao C, Zhang T. Selenium transformation and selenium-rich foods. *Food bioscience*. 2021;40:100875.
16. Khrantsov AG, Serov AV, Timchenko VP, Miroshnichenko MV. New biologically active drug based on selenium nanoparticles. *Vestnik Severo-Kavkazskogo gosudarstvennogo tekhnicheskogo universiteta = Bulletin of the North Caucasian State Technical University*. 2010;4:122-125. (In Russ.).
17. Khrantsov AG. Zero valent selenium in the technology of milk products. *Dairy Industry*. 2012;6:78-79. (In Russ.).
18. Khrantsov AG. KNNS technology platform for functional products. *Pererabotka moloka = Milk processing*. 2015;5(187):54-57. (In Russ.).

ИНФОРМАЦИЯ ОБ АВТОРАХ

Зафар Абдулович Рехман – ассистент кафедры физики и технологии наноструктур и материалов, физико-технический факультет, Северо-Кавказский федеральный

университет, +79624073291, <https://orcid.org/0000-0003-2809-4945>,
zafrehman1027@gmail.com

Максим Александрович Пирогов – студент 4 курса бакалавриата кафедры физики и технологии наноструктур и материалов, физико-технический факультет, Северо-Кавказский федеральный университет, +79614883920, <https://orcid.org/0000-0001-9217-6262>, pirogov.m.2002@gmail.com

Александр Владимирович Серов – доктор технических наук, доцент кафедры неорганической и физической химии, химический факультет, Северо-Кавказский федеральный университет, +79187409135, aserov@ncfu.ru

Шевченко Ирина Михайловна – кандидат технических наук, доцент кафедры физики и технологии наноструктур и материалов, физико-технический факультет, Северо-Кавказский федеральный университет, +79187873330, <https://orcid.org/0009-0005-9113-9335>, imshevchenko@ncfu.ru

Андрей Владимирович Блинов – кандидат технических наук, и.о. заведующего кафедрой физики и технологии наноструктур и материалов, физико-технический факультет, Северо-Кавказский федеральный университет, +79887679460, <https://orcid.org/0000-0001-9321-550X>, blinov.a@mail.ru

INFORMATION ABOUT THE AUTHORS

Zafar A. Rekhman – Assistant at the Department of Physics and Technology of Nanostructures and Materials, Faculty of Physics and Technology, North-Caucasus Federal University, +79624073291, <https://orcid.org/0000-0003-2809-4945>, zafrehman1027@gmail.com

Maxim A. Pirogov – Student of the Department of Physics and Technology of Nanostructures and Materials, Faculty of Physics and Technology, North-Caucasus Federal University, +79614883920, <https://orcid.org/0000-0001-9217-6262>, pirogov.m.2002@gmail.com

Alexander V. Serov – Dr. Sci. (Techn.), Associate Professor of the Department of Inorganic and Physical Chemistry, Faculty of Chemistry, North-Caucasus Federal University, +79187409135, aserov@ncfu.ru

Irina M. Shevchenko – PhD, Associate Professor of the Department of Physics and Technology of Nanostructures and Materials, Faculty of Physics and Technology, North-Caucasus Federal University, +79187873330, <https://orcid.org/0009-0005-9113-9335>, imshevchenko@ncfu.ru

Andrey V. Blinov – PhD, Head of the Department of Physics and Technology of Nanostructures and Materials, Faculty of Physics and Technology, North-Caucasus Federal University, +79887679460, <https://orcid.org/0000-0001-9321-550X>, blinov.a@mail.ru

Вклад авторов: все авторы внесли равный вклад в подготовку публикации.

Конфликт интересов: авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов.

Contribution of the authors: the authors contributed equally to this article.

Conflict of interest: the authors declare no conflicts of interests.

*Статья поступила в редакцию: 12.03.2024;
одобрена после рецензирования: 21.04.2024;
принята к публикации: 11.06.2024.*

*The article was submitted: 12.03.2024;
approved after reviewing: 21.04.2024;
accepted for publication: 11.06.2024.*