

УДК 541.15:541.515:543.422.27

ИК-ФУРЬЕ СПЕКТРОСКОПИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ГАММА-ОБЛУЧЕННОГО ПАПАИНА

© 2024 г. С. Р. Аллаяров^{1*}, Т. Н. Руднева², С. В. Демидов¹,
У. Ю. Аллаярова¹, С. Д. Чекалина¹

¹Федеральный исследовательский центр проблем химической физики и медицинской химии РАН,
Черноголовка, Россия

²Институт проблем технологии микроэлектроники и особо чистых материалов РАН,
Черноголовка, Россия

*E-mail: sadush@icp.ac.ru

Поступила в редакцию 28.04.2024 г.

После доработки 01.06.2024 г.

Принята к публикации 03.06.2024 г.

В макромолекулах папаина, облученных γ -лучами, образуются фрагменты с концевыми первичными аминогруппами, проявляющимися в ИК-Фурье спектрах в виде широкого пика с максимумом при 3440 см^{-1} , а также интенсивная полоса поглощения с центром при 1706 см^{-1} в результате валентных колебаний карбонильных групп. Интенсивность полос поглощения продуктов радиолитического распада линейно растет с дозой облучения папаина. Наряду с ростом дозы облучения наблюдается заметное ослабление интенсивности максимумов пиков поглощения пептидной связи, что свидетельствует о радиационной деструкции основной цепи папаина.

Ключевые слова: папаин, γ -облучение, ИК-Фурье спектры

DOI: 10.31857/S0023119324050087 **EDN** TXPYMC

ВВЕДЕНИЕ

Папаин является растительным ферментом, активный центр которого состоит из остатков аминокислот цистеина-25 и гистедина-159. Излучение может привести к изменениям в активном центре папаина, тем самым оказать влияние на его ферментативную активность. Действительно, по имеющимся данным [1], потеря протеолитической активности в зависимости от радиационной обработки папаина дозой до 10 кГр составляет около 20%, по сравнению с нативным ферментом. Те же дозы облучения были также использованы для сшивки и контроля размера наночастиц папаина, представляющих несомненный интерес в медицине [2]. Однако отсутствие информации в доступной литературе о влиянии дозы облучения свыше 10 кГр на папаин не позволяет определить влияние более широкого диапазона дозы облучения на структурные и другие свойства папаина, хотя они напрямую влияют на токсичность облученного папаина. Этот вопрос в рамках настоящей работы рассматривается

исследованием ИК-Фурье спектроскопией структурных изменений в составе папаина, облученного дозой от 30 до 3000 кГр. Изучение влияния соответствующих доз γ -облучения на ферментативную активность папаина является предметом дальнейших исследований.

Интерпретация ИК-спектров белков, чем является папаин, основывается на интерпретации составляющих белок аминокислот, поэтому исследованию ИК-спектров аминокислот посвящены многочисленные публикации, обобщенные в обзорных работах [3–5]. В общей сложности в ИК-спектрах белков или пептидов выделены до девяти характеристических полос [6], обозначаемых как амид А, амид В и амиды (I–VII). Они являются характерными полосами поглощения в ИК-диапазоне пептидной связи $-\text{NH}-\text{CO}-$ [7], образующейся в результате поликонденсации аминокислот в процессе формирования белков, содержащих не более 20 типов аминокислотных остатков и самой белковой (полипептидной) цепи. Среди характеристических

ИК-полос поглощения белков наибольшее значения имеют полосы амид I и II, часто используемые для изучения их вторичной структуры. Согласно [8], полоса амида I представляет собой преимущественно валентное колебание $C=O$ амидных групп и существует в области $1600–1700\text{ см}^{-1}$, тогда как полоса амида II представляет собой валентные колебания $C-N$ и существует в области $1480–1575\text{ см}^{-1}$.

Таким образом, основная цель настоящего исследования – влияние широкого диапазона дозы γ -облучения от 30 до 3000 кГр на ИК-Фурье спектры.

ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНАЯ ЧАСТЬ

Материалы

В работе использовали порошок папаина фирмы Ferak.

Гамма-облучение

Облучение образцов γ -лучами ^{60}Co проводили на установке УНУ “Гамма-100” ФИЦ ПХФ и МХ РАН при 23°C на воздухе при мощности дозы облучения 1.8 Гр/с .

ИК-спектрометрия

Анализ образцов папаина методом ИК-спектрометрии проводился в среднем ИК-диапазоне (в диапазоне волновых чисел от 4000 см^{-1} до 400 см^{-1}) при комнатной температуре на ИК-Фурье спектрометре Bruker ALPHA, оснащенный приставкой нарушенного полного внутреннего отражения с алмазной призмой однократного отражения (НПВО, FTIR-ATR).

РЕЗУЛЬТАТЫ ИССЛЕДОВАНИЯ И ОБСУЖДЕНИЕ

Исследование папаина методом ИК-спектроскопии

Многие пики поглощения в спектре порошка папаина (рис. 1, спектр а) соответствуют данным, представленным в литературе для белков [7–10] и папаина [8, 11]. В нем наблюдается широкая и интенсивная полоса на $3560–3000\text{ см}^{-1}$ с центром при 3263 см^{-1} (рис. 2, спектр а). Согласно [7], полоса поглощения на $3330–3280\text{ см}^{-1}$ относится к валентным колебаниям $N-H$ -связи макромолекул полипептидов, связанных межмолекулярной водородной связью. Следовательно, регистрируемую в спектре папаина полосу с центром при 3263 см^{-1} можно относить к валентным колебаниям $N-H$ -группы с межмолекулярными водородными связями. При этом регистрирующиеся в спектре при 3526 и 3440 см^{-1} полосы указывают на присутствие в структуре папаина NH_2 -групп, не участвующих в образовании водородных связей.

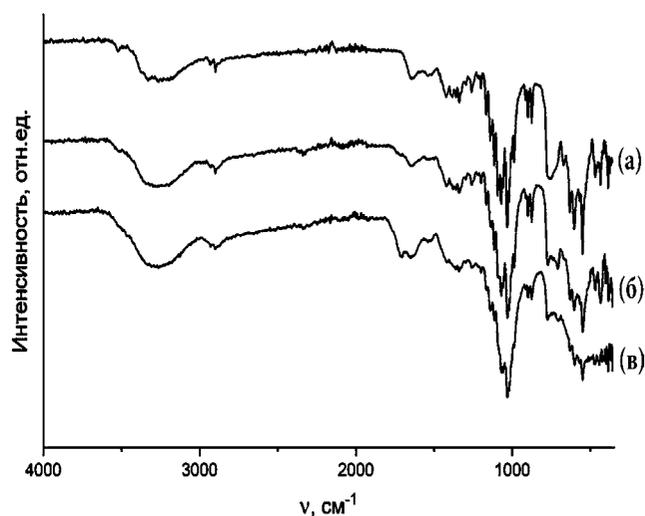


Рис. 1. Вид ИК-спектров образцов папаина в зависимости от дозы γ -облучения (кГр): 0 (а), 100 (б), 3000 (в).

При интерпретации полос в данной области ИК-спектра следует учесть, что колебание $\nu(OH)$ может также в ней проявляться и перекрывать поглощение валентных колебаний $N-H$ -группы пептидной связи папаина.

Таким образом, широкая полоса на $3560–3000\text{ см}^{-1}$, обусловленная валентными колебаниями $N-H$ -группы, участвующей в образовании водородной связи, частично может быть сформирована поглощением $\nu(OH)$ в составе макромолекул папаина. Малоаметный дублет в районе волновых чисел $3000–2800\text{ см}^{-1}$ отвечает асимметричным (2932 см^{-1}) и симметричным (2898 см^{-1}) валентным колебаниям $C-H$ -связей в CH_2 -группах папаина. При интерпретации полос поглощения в ИК-спектре папаина, как в спектре любого белка, следует учесть их сложную природу в результате наложения полос поглощения функциональных групп различных аминокислот, приводящего к проявлению большого числа широких полос поглощения с многочисленными максимумами (Табл. 1). Полосы амид I и амид II в суммарном спектре папаина регистрируются в области карбонильного поглощения, первая из них находится в интервале $1712–1610\text{ см}^{-1}$, а вторая регистрируется в области $1550–1490\text{ см}^{-1}$. Согласно литературным данным [7], в обычном спектре белка около 60% полосы амид II обусловлены деформационными колебаниями $N-H$ -связи, а остальная часть относится к валентным колебаниям связи $C=O$. В полосе амид I кроме $\nu(C=O)$ (~80%), также поглощают $\nu(C-N)$ (~10%) и $\delta(N-H)$ (~10%). Из чего следует, что в спектре папаина в полосу амид I наибольший

вклад вносят валентные колебания С=О группы, а полоса амид II обусловлена колебаниями δ (N–H) и ν (C=O) пептидной связи. В ИК-спектре папаина около 1259 и 631 см^{-1} в виде слабых пиков регистрируются соответствующие полосы поглощения амид III и амид IV. При формировании полосы амид III в разных долях участвуют колебания всех компонент пептидной связи белка [7]: ν (CN) (~30%), δ (N–H) (~30%), ν (C=O) (~10%), δ (O=C–N) (~10%) и в малой степени (~20%) колебания не пептидных фрагментов макромолекул белка. Получается, что полоса амид III в спектре папаина большей частью обусловлена колебаниями компонент пептидной связи, в основном δ (N–H) и ν (C–N) колебаниями. В то же время полоса амид IV в равной степени обусловлена как деформационными колебаниями O=C–N-группы пептидной связи, так и поглощениями колебаний не пептидной части макромолекул папаина. Сильная широкая полоса амид V около 774 см^{-1} в спектре папаина, характерна для внеплоскостных вверных колебаний связи N–H. Слабый пик при 603 см^{-1} в свою очередь обусловлен поглощением деформационных колебаний С=О-группы пептидной связи (полоса Амид VI).

Исследование γ -облученного папаина методом ИК-спектроскопии

Общий вид ИК-спектров образцов папаина, облученных различной дозой γ -излучения, представлены на рис. 1 и 2 (спектры б, в) со смещением вдоль оси ординат для удобства сравнения. Они в качественном плане во многом идентичны со спектром необлученного папаина. Тем не менее в результате облучения происходит изменение интенсивности отдельных полос, исчезновение ярко выраженного пика при 3526 см^{-1} , имеющегося в папаине до радиолитиза. В ИК-спектре папаина с дозой облучения растет интенсивность полосы поглощения в области 3560–3360 см^{-1} с максимумом при 3440 см^{-1} (рис. 2г), связанной, в первую очередь с валентными колебаниями в первичных аминах, N–H-связи, свободной от водородных связей.

Характерные сигналы полос поглощения С–Н-связей в спектрах γ -облученного папаина при 2932 и 2898 см^{-1} , связанные соответствующими асимметричными и антисимметричными валентными колебаниями, проявляются с очень малой интенсивностью. Это особенно заметно в ИК-Фурье спектре облученного относительно большими дозами папаина (рис. 2в) и не позволяет однозначно количественно проанализировать влияние дозы γ -облучения на относительное содержание таких фрагментов в облученном папаине.

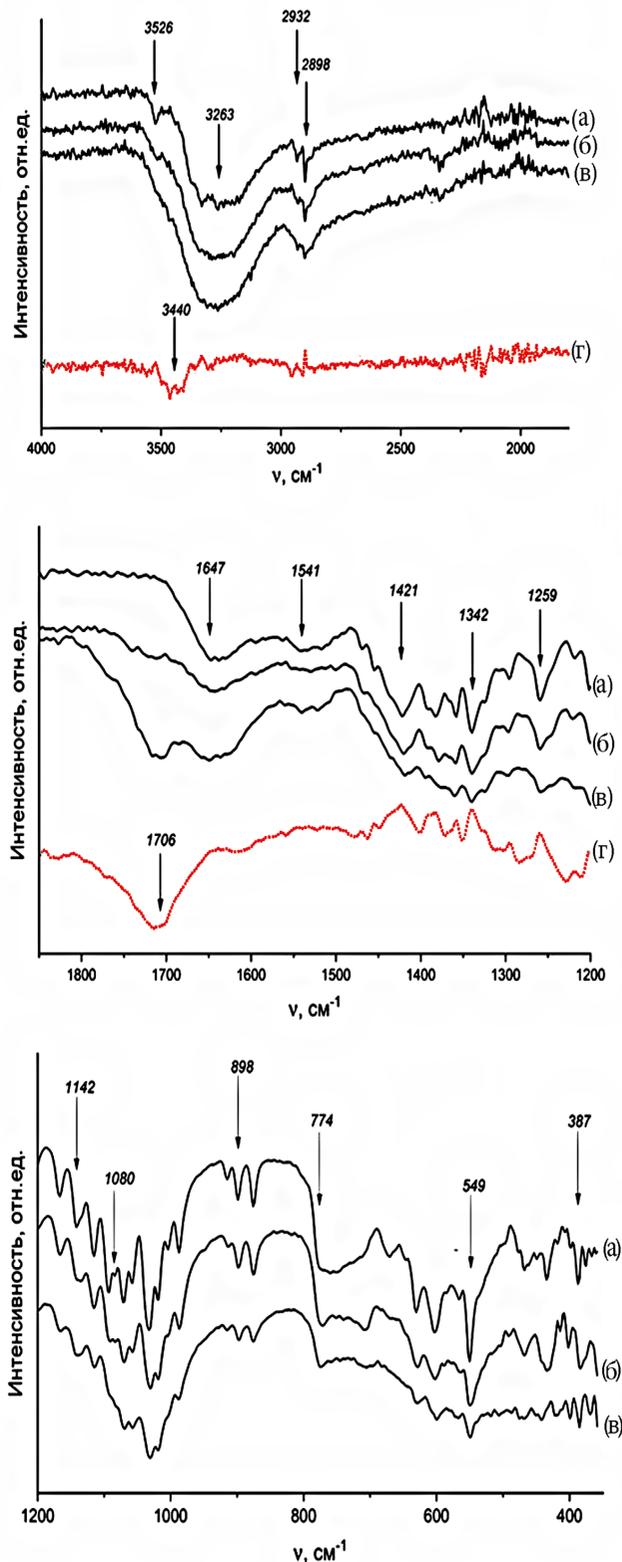


Рис. 2. Расширенные ИК-спектры папаина до (а) и после γ -облучения (б, в) дозой (кГр): 100 (б), 3000 (в). Спектр (г) получен путем вычитания спектра (а) из спектра (в).

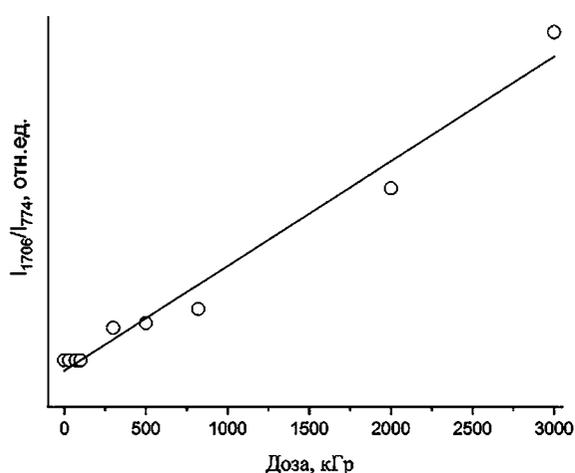


Рис. 3. Зависимость от дозы облучения папаина интенсивности полосы поглощения C=O (пик 1706 см^{-1}) относительно интенсивности полосы поглощения N—H (пик 774 см^{-1}).

При сравнительном анализе спектров необлученного и облученных образцов папаина на рис. 2 отчетливо видно снижение с дозой облучения интенсивностей полос поглощения C—H-связей при 2932 и 2898 см^{-1} в облученном папаине.

Наиболее характерной особенностью ИК-спектра γ -облученного папаина является появление широкой полосы поглощения 1706 см^{-1} , связанной с поглощением валентных колебаний карбонильной группы (рис. 2г). Ее интенсивность растет с дозой облучения (рис. 3), и полоса поглощения уширяется с ростом дозы облучения из-за накопления различных карбонилсодержащих групп. Действительно, в литературе [12] отмечено, что в ходе радиолиза белков образуются различные карбонилсодержащие продукты, большей частью которых являются органические кислоты, альдегиды, оксипроизводные и др.

На фоне роста с дозой облучения интенсивностей полос при 1708 и 3440 см^{-1} наблюдается снижение относительной интенсивности почти всех характеристических полос поглощения полипептидной связи. Из чего следует, что в ходе радиолиза происходит деструкция основной полипептидной связи папаина с образованием и накоплением продуктов, содержащих кислородсодержащие фрагменты и концевые первичные аминокруппы. Разумеется, сравнивая изменения от дозы облучения интенсивности полос поглощения, ответственных за CH, и CH₂ фрагменты, можно было бы оценить степень их участия в процессе радиационного превращения папаина. Однако их пики поглощения в области $3000\text{--}2800\text{ см}^{-1}$ регистрируются

с очень низкой интенсивностью, особенно в ИК-спектрах облученного папаина, что не позволяет более достоверно определить в них изменения интенсивности от дозы облучения.

Необходимо отметить, что из-за накопления в структуре макромолекул папаина хромофорной карбонильной, а также ауксохромной гидроксильной группы, первоначальный белый цвет папаина постепенно меняется сначала на светло-желтый, а затем в темно-желтый цвет с повышением дозы облучения.

Таким образом, сопоставление ИК-спектров исходного и γ -облученного папаина показывает, что при радиолизе данного фермента на воздухе в составе макромолекул папаина образуются и накапливаются кислородсодержащие и первичные аминокруппы (табл. 1).

Еще одной характерной чертой γ -облучения папаина на воздухе является снижение с дозой облучения относительной интенсивности характеристических полос полипептидной NH—CO-связи папаина. Полученные результаты показывают, что в процессе облучения папаина дозой $30\text{--}3000\text{ кГр}$ основным процессом является распад полипептидной связи. К сожалению, в спектрах как исходного, так и облученного папаина нам не удалось выделить полосы поглощения, характерные серосодержащим связям [7]: ν (S—H) (2635 см^{-1}), δ (S—H) ($895\text{--}785\text{ см}^{-1}$) и ν (C—S) ($750\text{--}630\text{ см}^{-1}$), хотя в составе макромолекул папаина находятся одна сульфогидрильная и три дисульфидных группы.

При этом необходимо отметить, что проведенные нами предварительные эксперименты показали, что полоса поглощения при 1706 см^{-1} появляется в ИК-спектрах образцов, облученных не только на воздухе, но и в вакууме, что свидетельствует о том, что карбонилсодержащие продукты, поглощающие в области 1706 см^{-1} могут образовываться не только в ходе радиационного окисления макромолекул папаина кислородом воздуха.

Обобщая вышесказанное, можно сделать вывод о том, что в ИК-спектрах γ -облученного папаина появляются полосы поглощения при 1706 и 3440 см^{-1} , связанные, соответственно, с поглощениями валентных колебаний карбонильной и концевой первичной аминокрупп. С увеличением дозы облучения происходит рост интенсивности и уширение полосы при 1706 см^{-1} в результате накопления различных продуктов радиолиза, содержащих карбонильную группу. Снижение с дозой облучения относительной интенсивности почти всех характеристических полос поглощения полипептидной NH—CO-связи папаина свидетельствует

Таблица 1. Соотнесение полос поглощения ИК-спектра папаина до и после радиолитиза γ -лучами ^{60}Co

Экспериментальные данные					Литературные данные [7, 9,10, 13–16]	Отнесение ⁶
Волновое число, см ⁻¹						
Доза облучения, кГр						
0	700 ^b	700 ^f	2000 ^g	3000 ^g	0	
3526 ср.	3526 о. о. сл.	3526 о. о. сл.	-	-	3500	$\nu_{\text{as}}(\text{NH}_2)$, своб.
					3550–3520	$\nu(\text{O}-\text{H})$, связ.
3440 пл.	3440 пл.	3440 пл.	3440 пл.	3440 пл.	3500–3400	$\nu(\text{NH}_2)$, своб., первич. амины, амиды
3331 сл.	-	-	-	-	3330–3350	$\nu(\text{N}-\text{H})$, связ., амид А
3263 о. с.	3263 о. с.	3263 о. с.	3263 о. с.	3263 о. с.	3300–3280	$\nu(\text{N}-\text{H})$, связ., N-однозамещенные амиды
					3370–3270	$\nu(\text{N}-\text{H})$, вторичные амиды
2932 сл.	2932 о. сл.	2932 о. сл.	2932 о. о. сл.	2932 о. о. сл.	2940–2915	$\nu_{\text{as}}(-\text{CH}_2-)$
2898, ср.	2898 о. сл.	2898 о. сл.	2898 о. о. сл.	2898 о. о. сл.	2890	$\nu(\text{C}-\text{H})$
2336 о. о. сл.	2336 о. о. сл.	2336 о. о. сл.	2336 о. о. сл.	2336 о. о. сл.	2349.3	$\nu_{\text{as}}(\text{O}=\text{C}=\text{O})$, CO_2
2111 сл.	2111 о. сл.	2111 о. сл.	2111 о. сл.	2111 о. сл.	2100–2250	$\nu(\text{C}\equiv\text{C})$
-	1706 сл.	1706 сл.	1706 ср.	1706 с.	1745–1700	$\nu(\text{C}=\text{O})$, дикарбоновые аминокислоты, сложные эфиры
1648 ср.	1648 ср.	1648 ср.	1648 ср.	1648 ср.	1650	$\nu(\text{C}=\text{O})$, полоса амид I
1558 о. о. сл.	1558 о. о. сл.	1558 о. о. сл.	1558 о. о. сл.	1558 о. о. сл.	1550–1485	$\delta(\text{N}-\text{H})$, $\nu(\text{C}-\text{N})$, полоса амид II
1541 сл.	1541 сл.	1541 сл.	1541 сл.	1541 сл.	-/-	-/-
1520 о. о. сл.	1520 о. о. сл.	1520 о. о. сл.	1520 о. о. сл.	1520 о. о. сл.	-/-	-/-
1508 о. о. сл.	1508 о. о. сл.	1508 о. о. сл.	1508 о. о. сл.	1508 о. о. сл.	-/-	-/-
1470 о. сл.	1470 о. сл.	1470 о. сл.	1470 о. сл.	1470 о. сл.	1465	$\delta(\text{CH}_2)$
1455 о. сл.	1455 о. сл.	1455 о. сл.	1455 о. сл.	1455 о. сл.	1450	$\delta_{\text{as}}(\text{CH}_3)$
1437 пл.	1437 пл.	1437 пл.	1437 пл.	1437 пл.	1432	$\delta(\text{CH}_2)$
1421 ср.	1421 ср.	1421 ср.	1421 ср.	1421 ср.	1420	$\delta(\text{CH}_2)$
1395 пл.	1395 пл.	1395 пл.	1395 пл.	1395 пл.	1399	$\delta(\text{O}-\text{H})$
1381 о. о. сл.	1381 о. о. сл.	1381 пл.	1381 пл.	1381 пл.	1382	$\delta_s(\text{CH}_3)$
1359 о. сл.	1359 о. сл.	1359 о. сл.	1359 о. о. сл.	1359 о. о. сл.	1362	$\delta(\text{CH}_2)$
1342 ср.	1342 сл.	1342 сл.	1342 сл.	1342 сл.	1344	$\delta(\text{C}-\text{H})$
1296 о. сл.	1296 о. сл.	1296 о. сл.	1296 о. о. сл.	1296 о. о. сл.	1304	$\delta(\text{C}-\text{H})$
1259 ср.	1259 сл.	1259 сл.	1259 сл.	1259 сл.	1255–1240	$\nu(\text{C}-\text{N})$, $\delta(\text{N}-\text{H})$, полоса амид III
1218 сл.	1218 сл.	1218 сл.	1218 о. сл.	1218 о. сл.	1223	$\nu(\text{C}-\text{O}-\text{C})$
1166 ср.	1166 ср.	1166 ср.	1166 ср.	1166 ср.	1167	$\nu_{\text{as}}(\text{O}-\text{C}-\text{O})$
1142 ср.	1142 ср.	1142 ср.	1142 ср.	1142 ср.	1143	$\nu_{\text{as}}(\text{O}-\text{C}-\text{O})$
1093 о. с.	1093 с.	1093 с.	1093 с.	1093 с.	1093	$\nu(\text{C}-\text{O})$, $\nu(\text{C}-\text{C})$
1070 сл.	1070 о. сл.	1070 о. сл.	1070 пл.	1070 пл.	1071	$\nu(\text{C}-\text{O})$, $\nu(\text{C}-\text{C})$
1056 о. сл.	1056 о. сл.	1056 о. сл.	1056 о. сл.	1056 о. сл.	1048–1053	$\nu(\text{C}-\text{O})$, $\nu(\text{C}-\text{C})$
1032 о. с.	1032 с.	1032 с.	1032 с.	1032 с.	1030	$\nu(\text{C}-\text{O})$, $\nu(\text{C}-\text{C})$
1018 сл.	1018 о. сл.	1018 о. сл.	1018 о. сл.	1018 о. сл.	1014	$\nu(\text{C}-\text{O})$, $\nu(\text{C}-\text{C})$
1004 сл.	1004 пл.	1004 пл.	1004 пл.	1004 пл.	1000	$\nu(\text{C}-\text{O})$, $\nu(\text{C}-\text{C})$
987 ср.	987 сл.	987 сл.	987 сл.	987 сл.	990	$\delta(\text{COO}^-)$
914 сл.	914 о. сл.	914 о. сл.	914 о. сл.	914 о. сл.	920	$\delta(\text{CH}_3)$
898 ср.	898 сл.	898 сл.	898 сл.	898 сл.	899	$\delta(\text{C}-\text{H})$
774 с.	774 с.	774 с.	774 с.	774 с.	860–675	$\delta(\text{N}-\text{H})$, полоса амид V
706 пл.	706 пл.	706 пл.	706 пл.	706 пл.	-/-	-/-

Таблица 1, продолжение

677 ср.	677 пл.	677 пл.	677 пл.	677 пл.	-//-	-//-
631 ср.	631 сл.	631 сл.	631 сл.	631 сл.	~625	$\delta(\text{O}=\text{C}-\text{N})$, полоса амид IV
603 ср.	603 сл.	603 сл.	603 сл.	603 сл.	~600	$\delta(\text{C}=\text{O})$, полоса амид VI
566 о. сл.	566 о. о. сл.	537–606	-//-			
549 с.	549 ср.	549 ср.	549 сл.	549 сл.	-//-	-//-
467 сл.	467 о. сл.	467 о. сл.	467 о. о. сл.	467 пл.	475–365	–CO–NH–Alk, скелетные колебания
433 сл.	433 о. о. сл.	433 о. о. сл.	433 о. о. сл.	433 пл.	-//-	-//-
387 ср.	387 ср.	387 ср.	387 ср.	387 ср.	-//-	-//-

^a интенсивность полосы поглощения: о.с. – очень сильная, с. – сильная, ср. – средняя, сл. – слабая, о. сл. – очень слабая, о. о. сл. – очень, очень слабая, пл. – плечо (перегиб);

^b ν – валентное колебание (ν_s симметричное, ν_{as} антисимметричное), δ – деформационное колебание (δ_s симметричное, δ_{as} антисимметричное);

^b облучение папаина γ -лучами производилось в вакууме;

^г облучение папаина γ -лучами производилось на воздухе.

о преобладании радиационной деструкции его основной цепи.

ИСТОЧНИК ФИНАНСИРОВАНИЯ

Работа была выполнена в рамках госзадания № 124013000722–8 с использованием УНУ «Гамматок-100 ФИЦ ПХФ и МХ РАН» и Центра коллективного пользования научным оборудованием ИПТМ РАН».

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Varca G.H.C., Kadlubowski S., Wolszczak M., Lugão A.B., Rosiak J.M., Ulanski P.* // J. Biolog. Macromol. 2016. V. 92. P. 654.
2. *Varca G.H.C., Ferraz C.C.F., Lopes P.S., Mathor M.B., Grasselli M., Lugão A.B.* // Rad. Phys. Chem. 2014. V. 94. P. 181.
3. *Pearson J.F., Slifkin M.A.* // Spectrochim. Acta. 1972. V. 28A. P. 2403.
4. *Keppu П.* Применение спектроскопии КР и РКР в биохимии. М.: Мир, 1985. 272 с.
5. *Wolpert M., Hellwig P.* // Spectrochim. Acta. 2006. V. 64A. P. 987.
6. *Pei Y., Wang J., Wu K., Xuan X., Lu X.* // Separ. Purific. Technol. 2009. V. 64. № 3. P. 288.
7. *Socrates G.* Infrared and Raman Characteristic Group Frequencies Tables and Charts Third Edition. NY: John Wiley & Sons, Inc., 2004.
8. *Bai Z., Chao Y., Zhang M., Han C., Zhu W., Chang Y. et al.* // J. Chem. 2013. V. 2013. Article 938154.
9. *Самсонова Л.Г.* Применение ИК и ПМР спектроскопии при изучении строения органических молекул. Учебно-методическое пособие. Томск: Издательский дом Томского гос. ун-та, 2016. 60 с.
10. *Тарасевич Б.Н.* ИК-спектры основных классов органических соединений. Справочные материалы. М.: Химический факультет МГУ, 2012. 54 с.
11. *Kanbargi K.D., Sonawane S.K., Arya S.S.* // Int. J. Food Prop. 2017. V. 20. № 12. P. 3215.
12. *Тимофеев-Ресовский Н.В., Савич А.В., Шальнов М.И.* Введение в молекулярную радиобиологию: физико-химические основы. М.: Медицина, 1981. 319 с.
13. *Кёниг Л.Л.* // Успехи химии. 1975. Т. XLIV. Вып. 6. С. 1109.
14. *Szymanska-Chargot M., Zdunek A.* // Food Biophysics. 2013. V. 8. P. 29.
15. *Купцов А.Х., Жижин Г.Н.* Фурье-КР и Фурье-ИК спектры полимеров. М.: Физматлит, 2001. 657 с.
16. *Седакова В.А., Громова Е.С.* // Вестник фармации. 2011. № 4. С. 17.

FOURIER TRANSFORM IR SPECTROSCOPIC STUDY OF GAMMA-IRRADIATED PAPAIN

S. R. Allayarov^{a, *}, T. N. Rudneva^b, S. V. Demidov^a, U. Yu. Allayarova^a, S. D. Chekalina^a

^aFederal Research Center for Problems of Chemical Physics and Medicinal Chemistry,
Russian Academy of Sciences, Chernogolovka, Russia

^bInstitute of microelectronics technology and high purity materials,
Russian Academy of Sciences, Chernogolovka, Russia

*E-mail: sadush@icp.ac.ru

In papain macromolecules irradiated with γ -rays, fragments with terminal primary amino groups are formed, which appear in FTIR spectra as a broad peak with a maximum at 3440 cm^{-1} , as well as an intense absorption band centred at 1706 cm^{-1} as a result of valence vibrations of carbonyl groups. The intensity of the absorption bands of the radiolysis products increases linearly with the irradiation dose of papain. At the same time, with increasing irradiation dose, a marked weakening of the intensity of the maxima of the absorption peaks of the peptide bond is observed, which indicates radiation destruction of the main chain of papain.

Keywords: papain, γ -irradiation, FTIR spectra

REFERENCES

1. Varca G.H.C., Kadlubowski S., Wolszczak M., Lugão A.B., Rosiak J.M., Ulanski P. // J. Biolog. Macromol. 2016. V. 92. P. 654.
2. Varca G.H.C., Ferraz C.C.F., Lopes P.S., Mathor M.B., Grasselli M., Lugão A.B. // Rad. Phys. Chem. 2014. V. 94. P. 181.
3. Pearson J.F., Slifkin M.A. // Spectrochim. Acta. 1972. V. 28A. P. 2403.
4. Carey P. Biochemical applications of Raman and resonance Raman spectroscopies. M.: Mir, 1985. 272 p.
5. Wolpert M., Hellwig P. // Spectrochim. Acta. 2006. V. 64A. P. 987.
6. Pei Y., Wang J., Wu K., Xuan X., Lu X. // Separ. Purific. Technol. 2009. V. 64. № 3. P. 288.
7. Socrates G. Infrared and Raman Characteristic Group Frequencies Tables and Charts Third Edition. NY: John Wiley & Sons, Inc., 2004.
8. Bai Z., Chao Y., Zhang M., Han C., Zhu W., Chang Y. et al. // J. Chem. 2013. V. 2013. Article 938154.
9. Samsonova L.G. Application of IR and PMR spectroscopy in the study of the structure of organic molecules Textbook. 2016. Tomsk: Publishing House of Tomsk State University, 60 p.
10. Tarasevich B.N. IK spektry osnovnykh klassov organicheskikh soedinenii. Spravochnye materialy (IR Spectra of Main Classes of Organic Compounds: Reference Materials), M.: Khimicheskii Fakul'tet MGU, 2012.
11. Kanbargi K.D., Sonawane S.K., Arya S.S. // Int. J. Food Prop. 2017. V. 20. № 12. P. 3215.
12. Timofeev-Resovsky N.V., Savich A.V., Shalnov M.I. Introduction to Molecular Radiobiology: Physical and Chemical Basis. M.: Medicine, 1981. 319 p.
13. Koenig L.L. // Uspekhi Khimii. 1975. V. XLIV. Iss. 6. P. 1109.
14. Szymanska-Chargot M., Zdunek A. // Food Biophysics. 2013. V. 8. P. 29.
15. Kuptsov A.Kh., Zhizhin G.N. FT-Raman and FT-IR spectra of polymers. M.: Fizmatlit, 2001. 657 p.
16. Sedakova V.A., Gromova E.S. // Bulletin of Pharmacy. 2011. № 4. P. 17.