**ТЕОРИЈСКО ПРОУЧАВАЊЕ МЕХАНИЗМА РЕАКЦИЈЕ ПЕГИЛОВАЊА** **IFN-α-2a,** **IFN-α-2b И IFN-β-1a**

# МАХАМЕД ТАЧАВЈАН, ДЕЈУШ АБИДИ, ФАТИМИ ЗИГИМЕТ и ЛЕЈЛА ЗИЈДАБЕДИНЕЏАД

*Biоsun Pharmed, Co., Техеран, Иран*

ИЗВОД

Урађена су *аb initio* и *DFT* израчунавања да би се проучио механизам реакције између *IFN-α-2a*, *IFN-α-2b* и *IFN-β-1a* групе полиетиленгликола (PEG). Израчунавања показују да се ради о концертованом механизму што је у сагласности са експерименталним резултатима. Међутим, иако изгледа де постоји само једно прелазно стање, особине његове структуре откривају веома синхрон механизам реакције. Реакције су веома егзотермне и имају релатвно мале енергије активације. Наше рачунарско проучавање показује да су најниже енергије прелазног стања повезане са *Lys 134*, *His 34* и *Met 1* у *IFN-α-2a*, *IFN-α-2b* односно *IFN-β-1a*.

***Кључне речи:*** IFN-α-2a; IFN-α-2b; IFN-β-1a; Пегиловање; Прелазно стање; DFT.