

МОДЕЛИРОВАНИЕ МЕХАНИЗМОВ РЕАКЦИЙ ФЕРМЕНТАТИВНОГО КАТАЛИЗА

Немухин А.В.

Химический факультет Московского государственного университета
имени М.В. Ломоносова, Россия, 119991, Москва, Ленинские горы 1/3;
Институт биохимической физики имени Н.М.Эмануэля РАН, Россия,
119334, Москва, улица Косыгина 4
тел: 495-939-10-96, факс: 495-939-02-83, E-mail: anemukhin@yahoo.com

В сообщении рассматриваются результаты моделирования механизмов реакций ферментативного катализа с использованием комбинированного метода квантовой механики – молекулярной механики (КМ/ММ). В этом подходе энергии и силы в активном центре молекулярной системы вычисляются по уравнениям квантовой химии, а роль белковой матрицы учитывается с помощью эмпирических силовых полей. Компьютерная реализация алгоритмов основана на использовании пакетов программ PCGAMESS и TINKER. Основное внимание уделено реакциям гидролиза субстратов сериновыми гидралазами, а также реакциям гидролиза гуанозинтрифосфата и аденозинтрифосфата.