

ДОСТИЖЕНИЯ И ПРОБЛЕМЫ МОДЕЛИРОВАНИЯ БИОМОЛЕКУЛЯРНЫХ СИСТЕМ МЕТОДАМИ КВАНТОВОЙ И МОЛЕКУЛЯРНОЙ МЕХАНИКИ (КМ/ММ)

Немухин А.В., Григоренко Б.Л., Поляков И.В.

МГУ имени М.В. Ломоносова, химический факультет, Москва, Ленинские Горы, 1

Доклад посвящен анализу современного состояния моделирования химических реакций в биомолекулярных системах методами квантовой и молекулярной механики (КМ/ММ). В этом подходе энергетические профили химических реакций вычисляются последовательными сериями оптимизаций геометрических параметров вдоль координат реакций, приводящими к стационарным точкам на поверхностях потенциальной энергии, отвечающим реагентам, продуктам, интермедиатам и переходным состояниям. Энергии и силы в активном центре системы (в квантовой подсистеме) рассчитываются методами квантовой химии, а в остальной части (в молекулярно-механической подсистеме) – с помощью классических силовых полей.

В докладе основное внимание уделено моделированию реакций ковалентного ингибирования основной протеазы вируса SARS-CoV-2 методами КМ/ММ.

Работа выполнена в рамках проекта Российского научного фонда 19-73-20032.