

Моделирование реакции гидролиза гуанозинтрифосфата ГТФ-азами

Шадрина Мария Сергеевна

аспирант

Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, Москва, Россия

E-mail: My-boxic@yandex.ru

Данная работа посвящена изучению реакции гидролиза гуанозинтрифосфата (ГТФ) в ГТФ-связывающих белках. Гидролиз ГТФ играет важную роль в различных биохимических процессах и является одной из распространенных химических реакций, происходящих в биологических системах. Детальные механизмы реакции гидролиза ГТФ в различных ГТФ-азах до сих пор не известны.

В настоящее время возрастает интерес к моделированию реакций, происходящих в живых системах, и наиболее перспективной группой методов моделирования реакций ферментативного катализа на данный момент можно считать гибридные методы квантовой и молекулярной механики (КМ/ММ). Эти методы позволяют моделировать механизмы химических превращений с учетом реального белкового окружения или молекул растворителя. В рамках приближения КМ/ММ непосредственные участники реакции описываются квантовохимическими методами, а оставшаяся часть – с помощью методов молекулярной механики.

Для моделирования методом КМ/ММ необходимо знание начальных координат атомов белка, гуанозинтрифосфата (ГТФ) и молекул воды в реакционном центре. Основным источником такой информации являются данные рентгеноструктурного анализа, которые уточняются с помощью метода молекулярной динамики.

Целью работы является расчет сечений поверхности потенциальной энергии для реакции гидролиза ГТФ в различных ГТФ-азах, что позволит детально описать элементарные стадии этой реакции и обосновать механизмы, предлагаемые по результатам экспериментальных исследований. Понимание процессов, происходящих внутри клетки на молекулярном уровне, поможет оказывать влияние на эти процессы, в частности, усовершенствовать критерии поиска активных компонентов новых лекарственных средств.