

Лаборатория Биокатализа и Биотрансформаций НИИ ФХБ им. А.Н. Белозерского
Руководители – д.х.н., проф. Швядас В.К., аспирант Нилов Д.К.
e-mail: vytas@belozersky.msu.ru, тел. 939-23-55, 939-44-84
Лабораторный корпус Б, комната 622

Изучение связывания пенициллина в активном центре пенициллинацилазы с помощью метода управляемой молекулярной динамики

Фермент пенициллинацилаза широко используется для модификации природных пенициллинов и представляет повышенный интерес для молекулярного моделирования. В работе предлагается исследовать путь пенициллина из раствора в активный центр фермента и описать взаимодействия с аминокислотными остатками, возникающие в процессе связывания субстрата ферментом. Движения белка и субстрата на атомном уровне будут моделироваться с помощью метода молекулярной динамики. Важной задачей будет облегчить транспорт пенициллина путем добавления внешней силы. Для этого к субстрату присоединяется виртуальная пружинка, которая затем медленно оттягивается в нужном направлении, увлекая за собой субстрат. Так как мы способствуем протеканию интересующего нас процесса, динамику с использованием внешней силы называют управляемой. Результаты работы дополнят знания о механизме катализа пенициллинацилазой, при этом студент получит навыки компьютерного моделирования сложных химических систем.

*Выполнение данной поисковой работы возможно студентом 3 или 4 курса, с хорошей успеваемостью, инициативным, интересующимся молекулярным моделированием и расчетными задачами. Желательны твердое знание основ строения и функционирования белков, а также опыт работы в командной строке UNIX. **Направление - молекулярное моделирование.***