

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 белка с лигандом с помощью управляемой молекулярной динамики.

Молекулярная динамика помогает прояснить тонкие детали биохимических процессов, когда другие экспериментальные методы уже бессильны: например, позволяет продемонстрировать на атомном уровне взаимодействие аминокислотных остатков белка с лигандом. К сожалению, вычислительная мощность компьютеров в настоящее время достаточна лишь для расчета траектории движения атомов порядка сотни наносекунд. Этого времени может оказаться недостаточно, чтобы «увидеть», например, проникновение субстрата из раствора в активный центр фермента. Однако проблема может быть решена с помощью метода управляемой динамики: для ускорения процесса 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 и называют управляемой.

В данной работе планируется ознакомление с методами моделирования сложных химических систем, получение навыков работы с пакетом программ Amber для расчета молекулярно-динамических траекторий, применение метода управляемой динамики к белок-лигандным комплексам, которые исследуются в лаборатории. Для расчетов предполагается использование вычислительных кластеров, в том числе суперкомпьютера СКИФ МГУ.

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