

Лаборатория Биокатализа и Биотрансформаций НИИ ФХБ им. А.Н. Белозерского

Руководители – аспирант ФББ Нилов Д.К., д.х.н., проф. Швядас В.К.

e-mail: nilov@belozersky.msu.ru, vytas@belozersky.msu.ru, тел. 939-23-55, 939-44-84

Лабораторный корпус Б, комната 534, 622

web: <http://enzyme.fbb.msu.ru/>, <http://biokinet.cmm.msu.ru/>

Молекулярное моделирование в биокатализе

Молекулярное моделирование в биоинженерии включает использование методов теоретической и вычислительной химии, таких как молекулярный докинг, классическая молекулярная динамика, гибридная квантово-механическая/молекулярно-механическая динамика. Основными направлениями моделирования в нашей лаборатории являются поиск новых лекарственных препаратов, мишенью которых служат вовлеченные в патологический процесс белки, а также рациональный дизайн ферментов с улучшенными каталитическими свойствами. Объектами исследования являются важные для промышленного биокатализа и медицины ферменты пенициллинацилаза, формиатдегидрогеназа, поли(АДФ-рибозо)-полимераза и др. Для расчетов используются программные средства AMBER (<http://ambermd.org/>), Lead Finder (<http://moltech.ru/>), PC GAMESS/Firefly (<http://classic.chem.msu.su/gran/firefly/index.html>) и вычислительные мощности суперкомпьютера МГУ.

Выполнение задач в рамках курсовой работы возможно студентами с хорошей успеваемостью, инициативными, интересующимися молекулярным моделированием и компьютерными расчетами. Желательны уверенное знание основ строения и функционирования белков, а также опыт работы в командной строке UNIX.