

## ПОСТРОЕНИЕ МОДЕЛИ МОЛЕКУЛЫ ЛИПОПОЛИСАХАРИДА

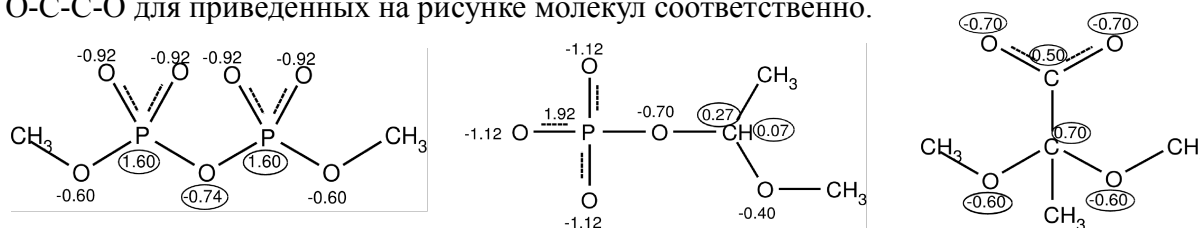
Галочкина<sup>1,2</sup> Т.В., Нестеренко А.М.<sup>1</sup>, Коваленко<sup>1,2</sup> И.Б., Зленко<sup>1</sup> Д.В.

<sup>1</sup>Московский Государственный Университет имени М.В. Ломоносова, Россия, 119991, Москва, Ленинские горы 1, корп.12, +7 (495) 939-02-89, [tat.galochkina@gmail.com](mailto:tat.galochkina@gmail.com)

<sup>2</sup>Федеральный научно-клинический центр ФМБА России, 115682, Москва, Ореховый бул. 28, +7(499)193-28-03

Наружный монослой внешней мембраны грамотрицательных бактерий в основном состоит из липополисахаридов (ЛПС). ЛПС являются очень иммуногенными молекулами, попадание в кровь которых является одной из основных причин септического шока. В последнее время получили широкое распространение методы очистки плазмы крови от ЛПС при помощи аффинной хроматографии. Для разработки новых сорбентов необходимо понимания деталей их взаимодействия с ЛПС, что требует построения модели молекулы ЛПС.

В основе модели ЛПС лежит силовое поле OPLS-AA [1]. В следствие высокой вариабельности структур молекул сахаров, в силовом поле OPLS-AA описаны не все встречающиеся в молекуле ЛПС сочетания атомов. Для отсутствующих фрагментов методами квантовой химии (КХ, [2]) были рассчитаны недостающие параметры. Для этого проблемные фрагменты были выделены из структуры ЛПС в виде небольших молекул, показанных на рисунке. Парциальные заряды атомов были скорректированы согласно процедуре RESP [3]. Модифицированы были только заряды атомов, находящихся на стыке фрагментов, для которых в силовом поле есть полное описание. Новые заряды отмечены на рисунке овалами. Потенциалы двугранных углов были перерасчитаны для фрагментов, содержащих сильно заряженные атомы, так как большие заряды очень сильно влияют на итоговый потенциал вращения торсионного угла. В частности, расчеты параметров были проведены для углов O-P-O-P, O-P-O-C и O-C-C-O для приведенных на рисунке молекул соответственно.



1. *W.L. Jorgensen, D.S. Maxwell, J. Tirado-Rives* Development and Testing of the OPLS All-Atom Force Field on Conformational Energetics and Properties of Organic Liquids. *J. Am. Chem. Soc.* 1996, 118, 11225-11236.
2. *Alex A. Granovsky*, Firefly version 8.0.0, [www.http://classic.chem.msu.su/gran/firefly/index.html](http://classic.chem.msu.su/gran/firefly/index.html)
3. *C.I. Bayly, P. Cieplak, W.D. Cornell, P.A. Kollman* A Well-Behaved Electrostatic Potential Based Method Using Charge Restraints For Determining Atom-Centered Charges: The RESP Model. *J. Phys. Chem.* 1993, 97, 10269-10280.