

ОБСУЖДЕНИЕ КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОГО ПОДХОДА ПРИ МОДЕЛИРОВАНИИ АКТИВНЫХ ЦЕНТРОВ ФЕРМЕНТАТИВНЫХ СИСТЕМ

Васильева Л.Ю., Уварова Л.А.¹, Романова Е.Ю.²

Московская государственная академия водного транспорта, Москва, Россия,

¹ФГБОУ ВПО МГТУ «СТАНКИН», Москва, Россия,

²ФГБОУ ВО Тверская сельскохозяйственная академия, Тверь, Россия

117105, Новоданиловская набережная, д.2, корп.1,

¹127055, Вадковский пер., д. 3А

²170904, Тверская область, г. Тверь, ул. Маршала Василевского (Сахарово), д. 7

E-mail: kati-v@yandex.ru

Рассматриваемые ферментативные системы относятся к бионаноконструкциям, молекула которых имеет в целом глобулярную структуру, в которую встроены функциональные участки - активные центры, содержащие ионы переходных металлов. Каждый фермент строго специфичен и его можно представить как белок-машину [1], активный центр работает по «заданной программе» и погружен в белковый матрикс, который сохраняет структуру.

Квантово-химический подход позволяет: 1) представить электронную структуру активного центра и показать, что его функционирование, в конечном итоге сопровождается перераспределением электронов на энергетических уровнях - молекулярных орбиталях активного центра и изменением зарядового состояния центральных ионов переходных металлов; 2) выделить разрешенные или запрещенные схемы функционирования активных центров; 3) представить механизмы действия ингибиторов и активаторов на функционирование ферментативных систем; 4) позволяет выявить универсальный механизм функционирования металлосодержащих энзимов; 5) рассмотреть информационные свойства бионаноконструкций [2].

Посвящаем эту работу памяти Д.С. Чернавского, с которым неоднократно обсуждались проблемы квантово-химического моделирования биосистем. Благодарны за советы и поддержку.

Работа выполнена при поддержке Министерства образования и науки РФ в рамках выполнения государственного задания в сфере научной деятельности (задание № 2014/105, проект № 1441).

Литература.

1. Чернавский Д.С., Чернавская Н.М. «Белок – машина». Биологические макромолекулярные конструкции. – М.: Янус-К, 1999. 256 стр.
2. Васильева Л.Ю., Романова Е.Ю. Бионаноконструкции - нелинейные самоорганизующиеся системы// Сб.н.тр. Фундаментальные физико-математические проблемы и моделирование технико-технологических систем/ Под ред. Уваровой Л.А. – М.: Янус-К, Т.2, Вып.16, 2013. Стр. 35 - 41