

## **РОЛЬ ЭЛЕКТРОННОЙ ПЛОТНОСТИ В ОПИСАНИИ РЕАКЦИОННЫХ ИНТЕРМЕДИАТОВ ФЕРМЕНТАТИВНЫХ ПРОЦЕССОВ**

**Коц Е.Д., Хренова М.Г.<sup>1</sup>**

Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, Химический факультет, кафедра физической химии, Россия, 119991, г. Москва, Ленинские горы, д. 1, стр. 3, Тел.: (495)939-20-35, E-mail: khrenova.maria@gmail.com

<sup>1</sup>ФИЦ Биотехнологии РАН, 119071, г. Москва, Ленинский проспект, д. 33, стр. 2

В последние несколько лет начал быстро развиваться новый вариант рентгеноструктурного анализа с использованием лазеров на свободных электронах (XFEL – X-ray Free Electron Lasers). Этот подход позволяет генерировать короткие (десятки фемтосекунд) хорошо сфокусированные рентгеновские импульсы, что позволяет получать данные с высоким временным разрешением и избегать разрушения кристалла вследствие большой дозы облучения, а также даёт возможность работать с небольшими кристаллами, что позволяет упростить процесс подготовки проб. Это открывает новые возможности для изучения механизмов ферментативных реакций. Однако современные методы рутинного анализа экспериментальной электронной плотности биологических кристаллов, как правило, используют простейшие представления сферических атомов. В данной работе будут проводиться расчеты электронной плотности реакционных интермедиатов и нековалентных комплексов ферментов с аналогами интермедиатов. Полученные плотности будут анализироваться как с помощью стандартного представления сферических атомов, так и в рамках более сложных моделей. В качестве примера будут проанализированы интермедиаты реакции гидролиза N-ацетиласпартата аспартоацилазой, а также нековалентного комплекса этого фермента с аналогом интермедиата. По результатам работы будут сформулированы методические рекомендации по адекватному восстановлению трехмерных структур реакционных интермедиатов из экспериментальных электронных плотностей.

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проект *18-29-13006 мк*).