

Секция «Биоинженерия и биоинформатика»

Молекулярная динамика фермент-лигандного комплекса

Аюпов Рустам Хасанович

Студент

*Казанский (Приволжский) Федеральный Университет, Институт
фундаментальной медицины и биологии, Казань, Россия*

E-mail: aurusta@mail.ru

Для изучения взаимодействия производного пиридоксина, возможного ингибитора ацетилолинэстеразы (АХЭ), была проведена молекулярная динамика в программе NAMD с использованием силового поля AMBER. Целью исследования являлось выявление возможного типа взаимодействия ингибитора с ферментом.

Координаты структур для динамики были получены после докинга в программе AutoDock [1]. Исходя из докинга и проведенного моделирования предполагается выявить возможный тип взаимодействия производных пиридоксина с АХЭ.

Динамика проводилась с использованием силового поля AMBER99 в программе NAMD2.8. Структура белка была помещена в ячейку, состоящую из молекул воды, полученную таким образом, чтобы ее границы находились на расстоянии 8 ангстрем от поверхности белка (всего в ячейку вошла 32135 молекул воды). Динамика проводилась с использованием периодических граничных условий, шаг интегрирования 2 фс, температура моделируемой системы 300 К. Запись траектории проводилась в течение 2 нс на каждом 800 шаге динамики. Размер ячейки составил 105×75×150 ангстрем. Для сокращения расчетов связи с атомами Н были зафиксированы.

Результаты динамики показали сближение производного пиридоксина (атома С) с Ser203 (атомом О гидроксильной группы), расстояние изменилось с 6.45 ангстрем (после докинга) до 3.85 ангстрем. Стабилизации этого положения способствуют водородные связи. На основе этого можно предсказать образование ковалентной связи между ингибитором и аминокислотным остатком Ser203.

Литература

1. Аюпов Р.Х., Акберова Н.И., Тарасов Д.С.. Докинг производных пиридоксина в активном центре холинэстераз // Учен. зап. Казан. ун-та. Сер. Естеств. науки - 2011.- Т. 153, кн. 3. - С. 107-118.

Слова благодарности

Выражаю благодарность научным руководителям зав. НИЛ, доценту Акберовой Н.И. и Тарасову Д.С.

Иллюстрации

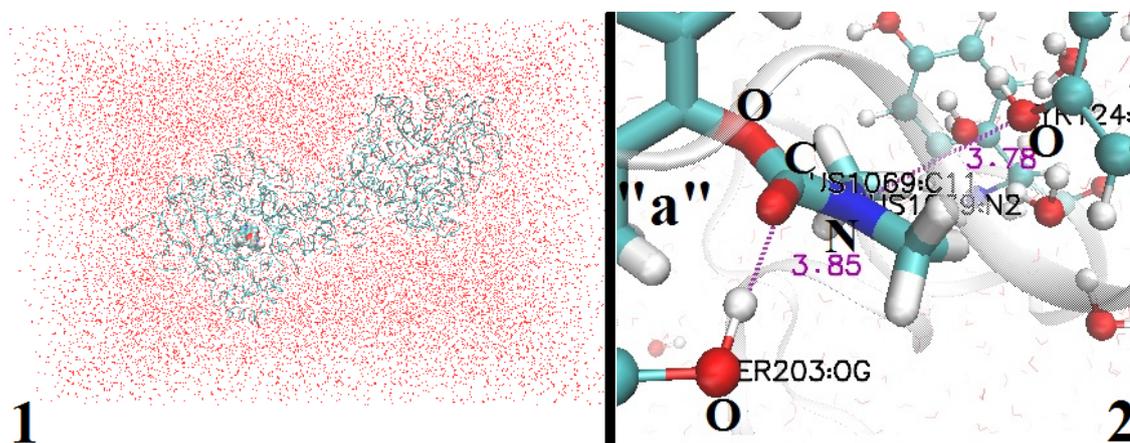


Рис. 1: 1.1 Молекулы поданные на динамику; 1.2 Положение лиганда после динамики