

## Секция «Биоинженерия и биоинформатика»

### Модификация силового поля Amber для моделирования пенициллинацилазы

*Гурьянова Н.Н.<sup>1</sup>, Нилов Д.К.<sup>2</sup>*

*1 - Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, Факультет биоинженерии и биоинформатики, 2 - Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, Факультет биоинженерии и биоинформатики, Москва, Россия*

*E-mail: gourianova.n@gmail.com*

Пенициллинацилаза является перспективным биокатализатором для использования в тонком органическом синтезе благодаря широкой субстратной специфичности к амидам, состоящим из консервативной фенилацетильной части и варибельной амидной части. В нашей лаборатории интенсивно исследуется возможность использования аминокислотных остатков в качестве амидной части субстрата. При молекулярном моделировании таких субстратов параметры аминокислот можно взять из стандартного силового поля Amber, однако остается необходимость параметризации фенилацетильного фрагмента. Кроме того, каталитический N-концевой остаток серина в бета-цепи пенициллинацилазы находится в редкой для концевой остатка незаряженной форме. Такой тип остатка является нестандартным и не описан в силовом поле. В представленной работе определены параметры фенилацетильного остатка и N-концевого незаряженного остатка серина, необходимые для молекулярного моделирования субстратной специфичности и стереоспецифичности пенициллинацилазы. Особое внимание было уделено оценке атомных зарядов – наиболее значимых параметров силового поля Amber. Для этой цели проводили расчет электростатического потенциала вокруг молекулы на HF/6-31G\* уровне теории, после чего определяли точечные заряды на атомах. Разработанные параметры были использованы в тестовых молекулярно-динамических симуляциях комплексов пенициллинацилазы с различными субстратами.

#### **Слова благодарности**

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства образования и науки России (госконтракт No. 02.740.11.0866).