**Динамика и структурные превращения системы алкогольдегидрогеназа-НАД, сорбированной на поверхности**

***Байгунов И.А1., Холмуродов Х.Т1,2., Грибова Е.Д1., Гладышев П.П1.***

*Аспирант, 2 год обучения направления «Химические науки»*

*1Государственный Университет «Дубна», Российская Федерация, г.Дубна*

*2Лаборатория Нейтронной Физики им. И.М.Франка, Объединенный Институт Ядерных Исследований, Российская Федерация, г.Дубна*

*E-mail: vanes1997fev@gmail.com*

Вопросы изучения сорбции белков с учетом различных химических взаимодействий с молекулами растворителя и конкретными фрагментам поверхности сорбентов, представляют собой актуальнейшие задачи для современной науки и технологий. [1] Применительно к задачам моделирования влияния pH на ориентацию сорбции белков ранее в [2-4] было изучено сорбционное поведение фермента алкогольдегидрогеназы, исходя из конкретных взаимодействий групп белка с группами на поверхности и ее заряда. В настоящей работе было проведено исследование конформации алкогольдегидрогеназы и ее ориентации относительно графитоподобного сорбента. Моделирование проводилось в пакете Amber, при этом решались две задачи для генерации pH и программы для расчета конформации и сорбции АДГ [5][6]. В результате проведенных вычислений была получена полноатомная модель системы «АДГ – солевой раствор – поверхность». Следует отметить, что результаты, полученные с применением современного компьютерного моделирования, полностью коррелируют с ранее полученными результатами с применением более простых подходов, не учитывающих некоторые изменения конформации алкогольдегидрогеназы при переходе из кристаллического состояния в раствор. Таким, образом, можно сделать вывод, что методы компьютерного моделирования позволяют рассчитать конформационное и ориентационное поведение белковой молекулы на поверхности при влиянии внешних факторов.

**Литература:**

1. Sarah Höhn, Kai Zheng, Stefan Romeis, Martin Brehl, Wolfgang Peukert, Dominique de Ligny, Sannakaisa Virtanen, Aldo R. Boccaccini. Effects of Medium pH and Preconditioning Treatment on Protein Adsorption on 45S5 Bioactive Glass Surfaces // Adv. Mater. Interfaces 2020, 7, 2000420. doi.org/10.1002/admi.202000420
2. Гладышев П.П., Горяев М.И., Шпильберг И.Г., Шаповалов Ю.А. Сорбционная иммобилизация НАД зависимых ферментных систем. Сообщ. I. Влияние электростатических взаимодействий на ориентацию алкогольдегидрогеназы на поверхности носителя Молекулярная биология, 1982, т.16, №5, с.938-942.
3. Гладышев П.П., Горяев М.И., Шпильберг И.Г. Сорбционная иммобилизация НАД зависимых ферментных систем. Сообщ. II. Влияние гидрофобных взаимодействий на ориентацию алкогольдегидрогеназы на поверхности носителя Молекулярная биология, 1982, т.16, №5, с.943-947.
4. Гладышев П.П., Шаповалов Ю.А., Квасова В.П. Реконструированные оксидоредуктазные системы. – Наука. КазССР, 1987.
5. Mongan J., Case D. A., McCAMMON J. A. Constant pH molecular dynamics in generalized Born implicit solvent //Journal of computational chemistry. – 2004. – Т. 25. – №. 16. – С. 2038- 2048. DOI: <https://doi:10.1002/jcc.20139>
6. Hendrik Heinz, Tzu-Jen Lin, Ratan K. Mishra, and Fateme S. Emami, Thermodynamically consistent force fields for the assembly of inorganic, organic, and biological nanostructures: The INTERFACE force field // *Langmuir*. -  **2013**. № 29. - pp. 1754-1765