

Карта электростатической настройки водородной связи

Научный руководитель – Ярошевич Игорь Александрович

Литовец Андрей Юрьевич

Студент (бакалавр)

Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова, Москва, Россия

E-mail: alitovets@mail.ru

Водородная связь (Hydrogen Bond, Hb) — межмолекулярное донорно-акцепторное взаимодействие, играющее важнейшую роль стабилизации регулярной структуры биополимеров. Hb фактически обеспечивают возможность формирования вторичной и третичной структуры белка, скрепляют двуцепочечную ДНК, определяют подавляющее большинство белок-лигандных взаимодействий [3]. Энергетический потенциал водородной связи значительно варьирует, и зависит в первую очередь от пары донора и акцептора протона. Кроме того, на взаимодействие между донором и акцептором протона способно влиять локальное молекулярное окружение [2], в том числе, внешнее электростатическое поле, наведенное внутренней структурой биополимеров [1]. Целью этой работы является генерализация принципов настройки потенциала Hb локальным микроокружением, и создание карты электростатической настройки водородной связи. Изучение и поиск закономерностей такой настройки возможно в рамках методов вычислительной квантовой химии. Первой задачей этой работы является ранжирование различных схем расчета Hb по соотношению качества расчета к времени с целью выбора оптимального протокола для проведения основного объема вычислений. Решение этой задачи позволяет ускорить и упростить путь к основной цели. В рамках уже проведенной работы оценены несколько альтернативных протоколов оценки энергии водородной связи между модельной парой бокового радикала тирозина (донор протона) и воды (акцептора протона).

Источники и литература

- 1) Duan, L.L., Gao, Y., Ji, C.G. et al. Energetics of protein backbone hydrogen bonds and their local electrostatic environment // Sci. China Chem. 2014. No. 57, C. 1708-1715
- 2) Huš M, Urbic T. Strength of hydrogen bonds of water depends on local environment // J Chem Phys. 2012. No. 136, C. 144305
- 3) Weiss, Manfred S. et al. More hydrogen bonds for the (structural) biologist // Trends in Biochemical Sciences. 2001. No. 26, C. 521-523