

metal-polymer composites were studied by the method of electron microscopy and were analyze their interaction with hydrogen. In the present work was determined the hydrogen storage capacity of the obtained metal-polymer powder TiFe coated with PTFE. Was shown the possibility of using the PTFE as hydrogen -permeable protective coating, which is good for the preventing oxidation of the active metal surface and capable of resist the activation process for the interaction with hydrogen.

МОДЕЛИРОВАНИЕ СТЕРЕОСЕЛЕКТИВНОСТИ ПЕНИЦИЛЛИНАМИДАЗЫ МЕТОДОМ ВОЗМУЩЕНИЯ СВОБОДНОЙ ЭНЕРГИИ

Зейфман А.А.¹, Перепёлкин В.В.², Новиков Ф.Н.¹, Строганов О.В.¹, Чиллов Г.Г.¹

1 ООО «Молекулярные Технологии», Москва, Россия (119992, ул. Ленинские Горы, д. 1, стр.75А)

2 Химический факультет МГУ им. М. В. Ломоносова, Москва, Россия
(119991, ГСП-1, Ленинские Горы, д. 1, стр.3)

Предложен новый подход к моделированию стереоселективности ферментативных реакций, основанный на применении метода возмущения свободной энергии в молекулярно-динамических расчётах. Для определения соотношения скоростей превращения энантиомеров рассчитывается разница между свободными энергиями комплексов белок-субстрат для разных энантиомеров, а также разница между свободными энергиями переходных состояний, на основании чего определяется итоговое различие в свободных энергиях активации реакций. Энергетическое различие хиральных состояний определяется, в свою очередь, путём постепенного перевода хирального атома каждого из энантиомеров в плоское ахиральное состояние, идентичное для обоих энантиомеров. Разработанный подход позволяет явным образом учитывать все атомы белка и лиганда, а также молекулы растворителя, и, путём усреднения по набору термодинамических состояний системы, приводит к истинному значению разницы свободной энергии активации реакции для двух энантиомеров субстрата. Проведённая валидация метода по известным экспериментальным данным показала его способность не только качественно, но и количественно предсказывать энантиоселективность гидролиза хирального субстрата пенициллинамидазы 2-фенил-N-(1-фенетил)ацетамида. В сочетании с существующими методами моделирования структур мутантных форм фермента предложенный метод расчёта стереоселективности позволит проводить направленный дизайн новых эффективных биокатализаторов.

MODELING OF PENICILLINAMIDASE ENANTIOSELECTIVITY BY FREE ENERGY PERTURBATION

Zeifman A.A.¹, Perepelkin V.V.², Novikov F.N.¹, Stroganov O.V.¹, Chilov G.G.¹

1 LLC Molecular Technologies, Moscow, Russia (119992, Leninskie Gory 1, bldg. 75A)

2 Chemistry Department, Moscow State University, Moscow, Russia (119991, Leninskie Gory 1, bldg. 3)

New free energy perturbation/molecular dynamics method for the calculation of enzymatic reactions enantioselectivity was proposed. Ratio of rate constants for two enantiomers is obtained by calculating free energy difference between initial enzyme-substrate complexes of both enantiomers and reaction transition states for both enantiomers, which together gives the difference in the activation energy. Free energy transition between enantiomers is achieved by planarizing the chiral carbon atoms. Proposed approach allows to account for all protein, solvent and ligand atoms and produces true free energy value due to averaging over the thermodynamic ensemble of states. It allowed not only to predict the direction of the enantioselectivity but gave numerical data which was in a good agreement with known experimental results for the hydrolysis of the chiral substrate by penicillinamidase - 2-phenyl-N-(1-phenethyl) acetamide. In conjunction with existing methods for modeling of mutant enzyme structures, proposed approach will allow for a straightforward design of novel efficient biocatalyzers.

КИНЕТИКА ПРОЦЕССА СИНТЕЗА НАНОРАЗМЕРНОГО ДИСУЛЬФИДА ВОЛЬФРАМА В УСЛОВИЯХ САМОРАСПРОСТРАНЯЮЩЕГОСЯ ВЫСОКОТЕМПЕРАТУРНОГО СИНТЕЗА

Иртегов Ю.А., Ажгихин М.И., Коробочкин В.В.

ФГБОУ ВПО «Национальный исследовательский Томский политехнический университет»,
Томск, Россия (634050, Томск, пр. Ленина, 30), e-mail:irtegovu@gmail.com

Исследована зависимость скорости горения нанопорошка вольфрама с серой и степени превращения в волне горения от давления аргона, а также от избытка серы в шихте при постоянном давлении синтеза. Представлены фотографии процесса горения стехиометрической смеси металла с серой, на основании которых была определена скорость горения образцов. Исследовано влияние избытка серы в шихте (от 0 до 20 % мас.) на максимальную температуру горения. Установлено, что при давлении 3 МПа увеличение избытка серы в шихте снижает скорость горения нанопорошка вольфрама с серой с 0,27 до 0,12 см/с. Установлено, что зависимость скорости горения от расчетной степени превращения наноразмерного порошка вольфрама и серы соответствует параболическому закону окисления. Значение энергии активации процесса взаимодействия нанопорошка вольфрама с серой в режиме высокотемпературного самораспространяющегося синтеза составляет 90,1 кДж/моль, что указывает на одновременное лимитирование скорости процесса за счет химической реакции и диффузии серы.