

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.

KINETICS OF TUNGSTEN DISULFIDE NANOPOWDER SYNTHESIS UNDER SELF-PROPAGATING HIGH TEMPERATURE SYNTHESIS CONDITIONS**Irtegov Y.A., Azhikhin M.I., Korobochkin V.V.**National Research Tomsk Polytechnic University, Tomsk, Russia
(634050, Tomsk, Lenin Avenue, 30), e-mail: irtegovu@gmail.com

Tungsten nanopowder with elementary sulfur combustion rate and conversion ratio in combustion wave dependence on argon pressure and on sulfur excess under constant pressure were studied. Synthesis was self-propagating high temperature synthesis (SHS). Stoichiometric mixture combustion process photographs based on which combustion rate was determined were represented. Effect of sulfur excess in reaction mixture (from 0 to 20 wt. %) on combustion temperature was studied under constant pressure. It was found that sulfur excess increasing under 3 MPa decreased combustion rate from 0.27 to 0.12 cm/s. Determined combustion rate dependence on conversion ratio tungsten nanopowder and sulfur is equal to parabolical oxidation law. Tungsten nanopowder and sulfur reaction energy activation under self-propagating high temperature synthesis conditions is equal to 90.1 kJ/mol that points to simultaneous rate process limitation on chemical reaction and sulfur diffusion.

УТОЧНЕНИЕ СТРУКТУРЫ СИНТЕТИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ 3-АРИЛ-КУМАРИНА С 1,4-БЕНЗОДИОКСАНОВЫМ ФРАГМЕНТОМ С ПОМОЩЬЮ МАСС-СПЕКТРОМЕТРИЧЕСКОГО АНАЛИЗА**Исмаилова Г.О.¹, Юлдашев Н.М.¹, Узакбергенова З.Д.², Калимбетова Р.Ю.², Аташов А.К.²**

1 Ташкентский педиатрический медицинский институт, Ташкент, Республика Узбекистан
(100140, Ташкент, ул. Богишамол, 223), e-mail: y_nosir@rambler.ru

2 Каракалпакский Государственный университет, Нукус, Республика Каракалпакстан
(230113, Нукус, ул. Акад. Ш. Абдирова, 1)

Описана характеристика возможных путей фрагментации синтетической модели 3-(2,3-дигидробензо [1,4] диоксин-6-ил)-хромен-2-он с помощью масс-спектра. Масс-спектрометрическое исследование синтезированного нового кумарина проведено на приборе Q-TOF LC-MS Agilent Technologies серии 6520B. Показано, что фрагментация синтетической модели 3-арил-кумарина с 1,4-бензодиоксановым фрагментом идет по четырем направлениям. Расщепление кумарина по первому направлению фрагментации молекулярного иона идет с образованием вторичного иона с m/z 181, по второму с m/z 152, по третьему фрагмент с m/z 127, и по четвертому направлению образуется фрагмент с m/z 165. Синтезированный новый 3-арил-кумарин с 1,4-бензодиоксановым фрагментом был исследован *in vitro* на антимикробактериальную активность против *M. Tuberculosis* H37Rv в BACTEC-12B и Erdman, который проявил 49 % противотуберкулезную активность.

STRUCTURE REFINEMENT OF 3-ARYL-COUMARINS SYNTHETIC MODEL WITH 1,4-BENZODIOKSAN FRAGMENT BY MASS SPECTROMETRIC ANALYSIS**Ismailova G.O.¹, Yuldashev N.M.¹, Uzakbergenova Z.D.², Kalimbetova R.Y.², Atashov A.K.²**

1 Tashkent Pediatric Medical Institute, Tashkent, Republic of Uzbekistan
(100140, Tashkent, Bogishamol str., 223), e-mail: y_nosir@rambler.ru

2 Karakalpakstan State University, Nukus, Republic of Karakalpakstan
(230113, Nukus, Acad. Abdirov Sh. str., 1)

There is describe the characteristics of the possible ways of fragmentation of 3-(2,3-dihydro-benzo [1,4] dioxin-6-yl)-chromen-2-one synthetic model a mass spectrum. Mass spectrometric investigation of the synthesized new coumarin carried out on a Q-TOF LC-MS Agilent Technologies Series 6520V. It is shown that the fragmentation of 3-aryl-coumarin synthetic model with 1,4-benzodioksanol fragment goes in four directions. Cleavage of coumarin in the first direction is the fragmentation of the molecular ion to form a secondary ion m/z 181, with the second m/z 152, the third fragment m/z 127 and the fourth direction is formed a fragment m/z 165. Synthesized new 3-aryl-coumarin with 1,4-benzodioksanol fragment was investigated *in vitro* on *M. antimycobacterial* activity against *Tuberculosis* H37Rv in BACTEC-12B and Erdman, who took 49% of anti-TB activity.

ВЛИЯНИЕ НАПОЛНИТЕЛЯ ПЕРЛИТ НА ТЕПЛОСТОЙКОСТЬ РЕЗИН НА ОСНОВЕ ЭТИЛЕНПРОПИЛЕНДИЕНОВОГО КАУЧУКА**Каблов В.Ф., Новопольцева О.М., Кочетков В.Г.**

Волжский политехнический институт (филиал) ФГБОУ ВПО «Волгоградский государственный технический университет», Волжский, Россия (404121, Волжский, ул. Энгельса, 42а), e-mail: nov@volpi.ru

Важной задачей является расширение температурных режимов эксплуатации резиновых технических изделий за счет повышения термостойкости эластомерных материалов. Одним из актуальных направлений решения этой задачи является использование в составе эластомерных композиций высокодисперсных наполнителей.