

Копач А.В.

**МОЛЕКУЛЯРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ СТРУКТУРЫ БИОПОЛИМЕРОВ:
ОСНОВНЫЕ МЕТОДЫ И ИХ ХАРАКТЕРИСТИКА**

Научный руководитель: канд. биол. наук, доц. Сутько И.П.

Кафедра биохимии

Гродненский государственный университет имени Янки Купалы, г. Гродно

Пространственная организация биополимеров во многом определяет их свойства и биологические функции. Изучение особенностей структуры биополимеров позволяет раскрыть механизмы функционирования живых систем на молекулярном уровне.

Наряду с экспериментальными методами всё более широкое применение получают методы молекулярного моделирования, позволяющие исследовать структуру биополимеров с использованием вычислительных подходов. Такие методы дают возможность не только визуализировать пространственную организацию макромолекул, но и анализировать их конформационную подвижность, устойчивость, внутримолекулярные взаимодействия и особенности связывания с другими молекулами. Особенно важны они в тех случаях, когда экспериментальное получение данных затруднено или требует значительных временных и материальных затрат.

К числу основных методов молекулярного моделирования структуры биополимеров относятся гомологическое моделирование, молекулярная механика, молекулярная динамика, докинг и др. Каждый из них имеет свои особенности и применяется в зависимости от объекта исследования, доступных исходных данных и требуемой точности. Их использование позволяет получать более полное представление о строении и свойствах биополимеров, а также о закономерностях, лежащих в основе их функционирования.

Гомологическое моделирование применяется в тех случаях, когда экспериментальная структура исследуемого биополимера неизвестна, но имеется структура родственной молекулы с близкой аминокислотной или нуклеотидной последовательностью. В этом случае модель строится на основе известного шаблона по принципу структурной схожести гомологичных молекул. Этот метод особенно широко используется для белков. Его основное преимущество – возможность быстро получить достоверную трёхмерную модель при наличии подходящего аналога.

Молекулярная механика основана на представлении молекулы как системы атомов, соединённых связями, подобно механической модели. Используется для оценки стабильности конформаций биополимеров, построения их пространственных моделей и анализа внутримолекулярных взаимодействий.

Молекулярная динамика позволяет проследить изменение пространственной структуры молекулы во времени на основе численного решения уравнений движения атомов. С помощью этого метода можно изучать конформационную подвижность белков, устойчивость вторичной и третичной структуры, взаимодействие макромолекул с лигандами, растворителем и мембранами.

Докинг является методом моделирования взаимодействия между биомолекулами, например между белком и лигандом. Его задача – определить наиболее вероятный способ пространственного связывания молекул и оценить устойчивость образующегося комплекса. Он позволяет анализировать активные центры, аффинность связывания, но качество результата зависит от точности исходной структуры и используемых алгоритмов оценки.

В настоящее время молекулярное моделирование широко используется для построения трёхмерных моделей белков и нуклеиновых кислот, исследования процессов укладки макромолекул, анализа межмолекулярных взаимодействий, а также для решения задач рационального дизайна лекарственных средств и биотехнологических разработок. Эти подходы позволяют объединять данные, полученные экспериментально, с результатами теоретического анализа и тем самым значительно расширяют возможности исследований.