

Теоретическое исследование особенностей акцептирования аденозина и его аза-, карба- и дезоксианалогов в активном центре аденозиндезаминазы

© Зарубин Юрий Павлович,^{*+} Склюев Прокофий Витальевич
и Пурыгин Петр Петрович

Кафедра органической, биоорганической и медицинской химии. Самарский государственный университет. Ул. Акад. Павлова, 1. г. Самара, 443011. Самарская область. Россия.

Тел.: (846) 334-54-59. E-mail: zarubin@ssu.samara.ru

^{*}Ведущий направление; ⁺Поддерживающий переписку

Ключевые слова: аденозиндезаминаза, механизм субстратной специфичности, аденозин, аналоги аза-, карба-, дезокси-, особенности акцептирования, теоретическое исследование.

Аннотация

С использованием методов докинга и молекулярно-механической оптимизации построены конформационные модели фермент-лигандных комплексов аденозиндезаминазы с аденозином и его аза-, карба- и дезоксианалогам. Оптимизацию конформационной энергии фермент-лигандных комплексов производили с использованием молекулярно-механического силового поля ММ3. Рассмотрены особенности акцептирования аденозиндезаминазой молекул аденозина и его аналогов в *N*- и *S*-областях псевдовращения фуранозного цикла. Установлены взаимосвязи между структурой фермент-лигандных комплексов и биохимическими свойствами лигандов в отношении аденозиндезаминазы.