

## **ГИДРАТАЦИЯ БИОКОМПЛЕКСОВ: МОДЕЛИРОВАНИЕ И ИЗУЧЕНИЕ ПЕРЕХОДНЫХ ПРОЦЕССОВ**

**Мосягина И.В., Зюзин М.В.**

115409, Москва, Каширское шоссе 31, e-mail: sosedka219@mail.ru e-mail:  
mishanya\_z@mail.ru

Общеизвестно, что биомолекулы в водных растворах гидратированы, т.е. окружены слоем более или менее связанных с ними водных молекул. Такие гидратные оболочки могут состоять из стандартных H<sub>2</sub>O модулей, объединяемых водородными связями по формальному алгоритму и способных образовывать фрактальные структуры. С использованием теории групп симметрии нами было непосредственно доказана возможность существования построенных водных структур. Продемонстрирована однозначная комплементарность периферии ряда биомолекул, идентифицированных рентгеноструктурным анализом, различным вариантам водных модульных структур. Это свидетельствует о равноправном вкладе воды и биологической субстанции в устойчивость пространственной конфигурации всей конструкции.

В нашем докладе акцент переносится на некоторые динамические следствия, вытекающие из данной концепции. Нами будут обсуждены механизмы образования межмолекулярных связей посредством предшествующего контактного взаимодействия гидратных оболочек молекул на примере структурно простых молекул моносахаридов, а также будет проанализирована роль хиральности гидратных оболочек в процессе распознавания одних молекул другими.

Кроме того нами построены модели гидратных комплексов двух видов: «околооболочечных» слоев и комплексов объемной воды. Предложен механизм перехода и структурной перестройки между этими двумя видами комплексов. Рассмотрено влияние орто-, пара-изомерии молекул воды на динамику переходных процессов. С учетом экспериментальных данных, взятых из ряда статей, были смоделированы комплексы, наиболее адекватно реализующие картину переходных процессов между гидратными оболочками биомолекул и связанными структурами объемной воды.