**Измайлов Сергей Александрович Разработка и приложение алгоритмов молекулярной динамики и спиновой динамики в исследованиях полипептидных цепей: от неупорядоченных пептидов к кристаллическим белкам**

ОГЛАВЛЕНИЕ ДИССЕРТАЦИИ

кандидат наук Измайлов Сергей Александрович

1.1 Результаты и обсуждение

1.1.1 15М релаксация как тест моделирования МД с использованием различных моделей воды

1.1.2 Сверхбыстрые движения

1.1.3 Подгонка корреляционных функций

1.1.4 Температурная зависимость корреляционных функций

1.1.5 Роль динамики углов основной цепи: гармонические флуктуации и прыжки

1.1.6 Вращательное движение

1.2 Материалы и методы

1.2.1 Приготовление образца

1.2.2 ЯМР измерения

1.2.3 МД моделирование

1.2.4 Обработка траекторий МД

1.3 Заключение

1.4 Дополнительная информация

Глава 2: Простая МД модель сворачивания белков и пептидов в окислительных условиях

2.1 Результаты и обсуждение

2.1.1 Общие вопросы образования дисульфидных связей

2.1.2 МД модель образования дисульфидных связей

2.1.3 Моделирование гуанилина

2.1.4 Окислительное сворачивание гуанилина

2.1.5 Анализ структур гуанилина

2.1.6 Кинетический и термодинамический контроль

2.1.7 Моделирование гуанилина с подстраиваемой реакционной способностью тиола

2.1.8 Окислительное сворачивание гуанилина в составе прогуанилина

2.2 Материалы и методы

2.3 Заключение

2.4 Дополнительные материалы

Глава 3: Моделирование спектров ЭПР спин-меченого белка GB1 с помощью уравнений спиновой динамики и длинных МД траекторий

3.1 Результаты и обсуждение

3.1.1 МД моделирование спектров ЭПР и сравнение с экспериментами

3.1.2 Размещение спиновой метки в скрытых сайтах

3.1.3 Простые определяющие факторы формы линий ЭПР

3.1.4 Специфические взаимодействия с участием метки Я1

3.1.5 Конформационная динамика экспонированной в растворитель метки

Я1

3.1.6 Роль вращения белка

3.1.7 Теория Редфилда для описания спектров ЭПР. Эффект кросс-корреляций (TROSY)

3.2 Материалы и методы

3.2.1 Приготовление образца

3.2.2 ЭПР измерения и обработка спектров

3.2.3 МД моделирование и обработка МД траекторий

3.3 Заключение

3.4 Дополнительные материалы

3.4.1 Расчет спектров ЭПР

3.4.2 Обработка данных МД

Глава 4: Медленный конформационный обмен и качательное движение в кристаллах убиквитина

4.1 Результаты и обсуждение

4.1.1 Теория

4.1.2 Кристаллические контакты замедляют обмен в-поворота между состояниями I и II

4.1.3 Заселенности состояний вI и вII в разных кристаллах

4.1.4 Молекулы убиквитина в кристаллах cubic-PEG-ub испытывают кача-тельное движение с характерным временем в десятки микросекунд

4.1.5 Межмолекулярные контакты, изменяющие конформационное равновесие

4.1.6 Возможная связь между качательным движением и вI/вII обменом

4.1.7 Релаксационная дисперсия

4.1.8 Обсуждение

4.2 Материалы и методы

4.2.1 Приготовление образца

4.2.2 Твердотельный ЯМР и анализ данных

4.2.3 МД моделирование

4.3 Дополнительные материалы

4.3.1 Подгонки ЖИЛЮ

4.3.2 МД моделирование

Глава 5: Программное обеспечение

5.1 Пакетный запуск МД траекторий

5.2 Анализ МД траекторий

Заключение