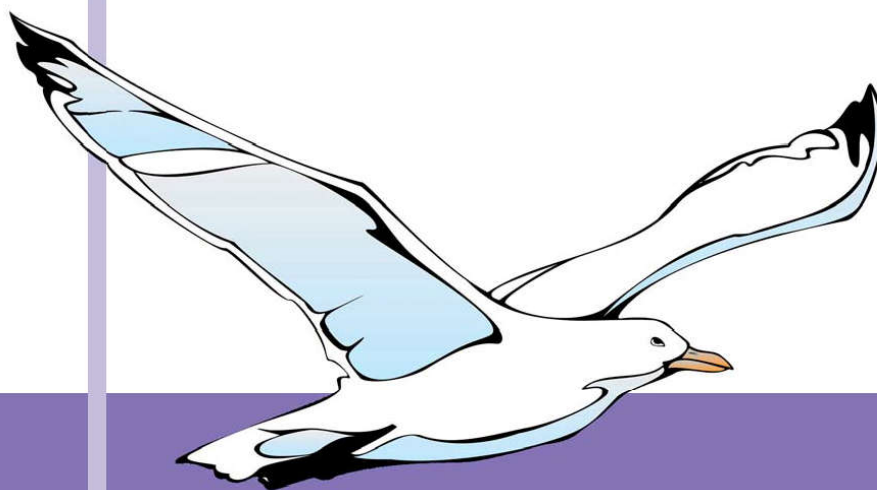


ТУАПСЕ 2021

Современная химическая физика

XXXIII Симпозиум



сборник
тезисов

24 сентября - 4 октября 2021 года
Пансионат «Маяк», г. Туапсе

ISBN

Современная химическая физика
XXXIII Симпозиум

Сборник тезисов

ISBN

16.50 **Хренова Мария Григорьевна** "Молекулярные механизмы гидролиза иминопенема металло- β -лактамазами NDM-1 и L1: сходства и различия"

17.05 **Пахомов Георгий Львович** "Фотопроводимость и строение ультратонких пленок петропорфиринов и их аналогов"

17.20 **Осик Наталья Алексеевна** "Антиоксидантные свойства овотиола А"

17.35 **Кошман Владимир Евгеньевич** "Исследование влияния тиосемикарбазонов на процессы перекисного окисления липидов"

26 СЕНТЯБРЯ, ВОСКРЕСЕНЬЕ

Утренняя сессия

Горение и взрыв

Ведущий: д.ф.-м.н. Медведев С.П.

9.00 **Тереза Анатолий Михайлович** "Термическая конверсия газообразных продуктов пиролиза полиэтилена, пропилена и автомобильных шин"

9.15 **Штерцер Александр Александрович** "Детонация богатых ацетиленокислородных смесей и ее использование для получения водорода и наноразмерного углерода"

9.30 **Михалкин Виктор Николаевич** "Экспериментальное исследование горения ацетона"

9.45 **Серопян Степан Арутюнович** "Получение сваркой взрывом металло-интерметаллидного слоистого композиционного материала на основе NiAl"

10.00 **Андержанов Энэс Камильевич** "Применение периодического искрового разряда для исследования воспламенения смесей водород–воздух в турбулентной камере сгорания"

10.15 Перерыв

10.30 **Кислов Владимир Михайлович** "Энергоэффективность газификации твердых топлив в режиме фильтрационного горения"

10.45 **Иванцов Артем Николаевич** "Взаимодействие сферических ударных волн с перфорированной преградой в конической ударной трубе"

11.00 **Кучумова Иванна Денисовна** "Механизмы изнашивания детонационных покрытий из сплава $\text{Fe}_{66}\text{Cr}_{10}\text{Nb}_5\text{B}_1$ в условиях сухого возвратно-поступательного трения"

11.15 **Петров Евгений Владимирович** "Исследование ударно-волнового нагружения поверхности преграды частицами порошков"

11.30 **Рейнгардт Елена Владимировна** "Расчеты детонационных характеристик составов на основе ТКХ-50"

Молекулярные механизмы гидролиза имипенема металло- β -лактамазами NDM-1 и L1: сходства и различия

Кривицкая А.В.¹, Хренова М.Г.^{1,2}

1. ФИЦ «Фундаментальные основы биотехнологии» РАН, Москва

2. МГУ им. М.В.Ломоносова, Москва

Борьба с бактериальной резистентностью к β -лактамным антибиотикам является актуальной задачей. Один из механизмов связан с инактивацией бактериальными ферментами β -лактамазами β -лактамных антибиотиков в ходе реакции гидролиза. Реакция инициируется нуклеофильной атакой каталитического гидроксид-аниона на карбонильный углерод β -лактамного кольца, что в дальнейшем приводит к разрыву связи углерод-азот и необратимой инактивации антибактериального средства. В частности, такую реакцию проводят металло- β -лактамазы L1 и NDM-1. В данной работе рассмотрена реакция гидролиза антибиотика имипенема из класса карбапенемов металло- β -лактамазами этими ферментами. Из экспериментальных данных известно, что конечным продуктом для обоих ферментов является протонированный по углероду R изомер имипенема, который с течением времени эпитеримизируется в S изомер. Остается неясным образуется ли C-протонированный продукт в активном центре или в результате быстрой таутомеризации в растворе из N-протонированного продукта. Рассчитанные комбинированным методом квантовой механики/молекулярной механики профили химической реакции демонстрируют, что в случае NDM-1 имеет место образование S изомера C-протонированного продукта, но предпочтительным продуктом гидролиза обоих ферментов является N продукт. Образование C-протонированного продукта в NDM-1 объясняется наличием альтернативного канала протонирования, в L1 этот канал перекрыт остатком Pro226. Дальнейшее исследование молекулярной динамики N-протонированного имипенема в растворе показало, что предпочтительной конформацией является конформация для таутомеризации в R положение. Более того, молекулярная динамика C-протонированных продуктов продемонстрировала предпочтительную эпитеримизацию R в S, что согласуется с известными экспериментальными данными.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (проект 18-74-10056).