

# ФИЗИЧЕСКАЯ ХИМИЯ БИОПРОЦЕССОВ

Химическая кинетика  
биопроцессов

Структура и реакционная  
способность, квантовая химия  
биомолекул

Физическая химия белков

Приложения  
химико-кинетических  
исследований



URSS

ББК 24.5 28.04 28.070 28.071 28.072 30.16

**Физическая химия биопроцессов** / Под ред. С. Д. Варфоломеева.  
М.: КРАСАНД, 2014. — 800 с.

Коллективная монография подводит итоги большого периода исследований в области количественного изучения биологических явлений на молекулярном уровне. Основной методической проблемой исследования биологических систем является их принципиальное усложнение по сравнению с химическими системами. Современная физическая химия биопроцессов решает эту проблему путем совершенствования экспериментальных методов и вычислительных процедур. Предлагаемая книга на ряде примеров демонстрирует специфику подхода физической химии, особенности методологии, глубину получаемых результатов.

Монография содержит четыре раздела. Первая глава посвящена новым химико-кинетическим задачам в описании поведения биосистем – определению условий устойчивости сложных биологических процессов, рассмотрению нелинейных моделей биокинетики. Во второй главе обсуждаются проблемы связи структуры и реакционной способности биомолекул – ферментов, некоторых биологически активных соединений. Представлены качественно новые возможности использования методов квантовой химии с использованием суперкомпьютеров для моделирования динамических процессов с участием ферментов. Различным аспектам физической химии белков посвящена третья глава. В заключительной главе книги приведены некоторые приложения физико-химических исследований биосистем и биопроцессов для решения разнообразных практических задач: кинетические подходы в фармацевтическом скрининге, структурный и кинетический полиморфизм ферментов человека как новая платформа молекулярной диагностики, масс-спектрометрия высокого разрешения для анализа белков. Физическая химия также является основой создания и развития новых технологических направлений, таких как получение и производство биотоплива.

Книга будет полезна студентам, аспирантам и научным сотрудникам, специализирующимся в области физической химии, физико-химической биологии, биохимии и молекулярной биологии, биотехнологии.

Издательство «КРАСАНД». 117335, Москва, Нахимовский пр-т, 56.  
Формат 70×100/16. Печ. л. 50. Зак. № К-385.

Отпечатано в ОАО «ИПК «Чувашия». 428019, г. Чебоксары, пр-т И. Яковлева, 13.

ISBN 978–5–396–00585–3

© Коллектив авторов, 2013

14085 ID 175289



9 785396 005853



Все права защищены. Никакая часть настоящей книги не может быть воспроизведена или передана в какой бы то ни было форме и какими бы то ни было средствами, будь то электронные или механические, включая фотокопирование и запись на магнитный носитель, а также размещение в Интернете, если на то нет письменного разрешения владельца.

# СОДЕРЖАНИЕ

<b>Предисловие редактора</b> .....	<b>5</b>
<b>Глава 1. Химическая кинетика биопроцессов</b> .....	<b>11</b>
Устойчивость процессов в многостадийных биокаталитических реакциях. Устойчивость метаболизма.....	13
<i>С. Д. Варфоломеев, А. В. Луковенков, Н. А. Семенова</i>	
Нелинейные модели биокинетики и их параметрический анализ .....	68
<i>В. И. Быков, С. Б. Цыбенова</i>	
<b>Глава 2. Структура и реакционная способность, квантовая химия биомолекул</b> .....	<b>139</b>
Квантово-химическое моделирование в исследовании молекулярных механизмов действия ферментов .....	141
<i>А. В. Немухин, Б. Л. Григоренко, С. В. Луцкекина, В. С. Полемских, Д. А. Новичкова, С. Д. Варфоломеев</i>	
Энергия диссоциации О–Н-связи природных фенолов .....	189
<i>Т. Г. Денисова, Е. Т. Денисов</i>	
Роль окисления и генерирования $\text{HO}\cdot$ в антималярийном действии артемизинина .....	213
<i>Е. Т. Денисов, Т. Г. Денисова</i>	
<b>Глава 3. Физическая химия белков</b> .....	<b>247</b>
Генетическая инженерия люцифераз светляков. Взаимосвязь между структурой и термостабильностью ферментов.....	249
<i>Н. Н. Угарова, М. И. Кокшаров</i>	

---

Перенос электрона в белковых системах.....	291
<i>А. И. Котельников, Э. С. Медведев, Н. С. Горячев</i>	
<b>Цветные иллюстрации к главам 2 и 3 .....</b>	<b>336</b>
Адсорбция белков на кремнеземах.....	337
<i>Е. С. Чухрай, Л. Ф. Атякшева</i>	
Нековалентное взаимодействие биомакромолекул с полиметиновыми красителями-зондами.....	381
<i>А. С. Татиколов</i>	
Каталитические центры гидролаз: структура и каталитический цикл .....	453
<i>С. Д. Варфоломеев, И. А. Гариев, И. В. Упоров</i>	
Химия и молекулярная физиология зрения: светочувствительный белок родопсин .....	502
<i>М. А. Островский, Т. Б. Фельдман</i>	
<b>Глава 4. Приложения химико-кинетических исследований.....</b>	<b>551</b>
Кинетические подходы в фармацевтическом скрининге с использованием неспецифических биосенсоров .....	553
<i>С. Э. Кондаков, М. Я. Мельников</i>	
Структурный и каталитический полиморфизм ферментов человека. Современные потенциальные платформы биомедицинской диагностики .....	615
<i>В. С. Курова, И. Н. Курочкин, Г. Р. Каламкаров, А. Е. Бугрова, К. Ю. Федорченко, С. Д. Варфоломеев</i>	
Анализ молекул биологического происхождения методами масс-спектрометрии высокого разрешения (пептиды и белки).....	673
<i>И. А. Попов, А. С. Кононихин, Е. Н. Кукаев, Н. Л. Стародубцева, М. И. Индейкина, Ю. И. Костюкевич, Г. Н. Владимиров, М. И. Николаева, С. И. Пеков, Е. Н. Николаев</i>	
Биотоплива.....	725
<i>С. Д. Варфоломеев, Е. Н. Ефременко, Л. П. Крылова</i>	