

Пленарные доклады

Построены модели термодинамических, диэлектрических, оптических и релаксационных свойств жидких неидеальных систем, определяемых молекулярными параметрами различной природы. Впервые выявлены дальние корреляции молекул в жидкостях, изучены структура, свойства и термодинамика образования супрамолекулярных агрегатов, состоящих из десятков молекул, показаны возможности априорного расчета имеющих нано размеры при “обычных” параметрах состояния, и характеризующихся дальними молекулярными корреляциями за пределами ближайших координационных сфер. Показаны возможности априорного расчета диэлектрических свойств спиртов на основе развитых моделей в интервале температур от нормальных до критических и сверх критических параметров состояния [4,5]. Развитые методы изучения надмолекулярной организации жидкостей сопоставлены с дифракционными, спектроскопическими, компьютерное моделирование, и др., методами изучения структуры неупорядоченных конденсированных систем.

Работа поддержана проектами РФФИ N 07-03-01105, и 10-03-01164) и проектом МОН N 2.1.1/3305.)

1. В.А. Дуров. В книге - //Концентрированные и насыщенные растворы. Монография. /Серия “Проблемы химии растворов”. М.: “Наука”, 2002. С. 170-254.
2. V.A. Durov. J. Mol. Liq., 2003, 118(1-3), 101-110, 41-82, 2005, 118(1-3), 101-110, 2004, **113**, N 1-3, p 81-99.,
3. V.A. Durov. // Pure&Applied Chemistry, 2004, 76, N 1, p.1-10.
4. V.A. Durov, I.Yu. Shilov. // J. Mol. Liq., 2007, **136**, 300-309.
5. V.A. Durov, I.Yu. Shilov, and O.G. Tereshin. // J. Phys. Chem. B, 2008

ПРЕИМУЩЕСТВА СКФ-РЕАКЦИОННЫХ СРЕД В ОРГАНИЧЕСКОМ СИНТЕЗЕ: МИФЫ И РЕАЛЬНОСТЬ

Чибиряев А.М.^{1,2}

¹ Институт катализа им. Г.К. Борескова, СО РАН, Новосибирск, Россия

² Новосибирский государственный университет, Новосибирск, Россия

chibirv@catalysis.ru

С начала или даже середины 90-х годов прошлого столетия в научном мире возник очередной бум – исследование и применение в научной практике сверхкритических флюидов (СКФ). Исследователи в своих работах, как правило, обращали своё внимание на какое-нибудь одно из свойств СКФ, немного преувеличивая его важность и не «замечая» при этом других неотъемлемых качеств, не всегда положительных. Таким образом, было положено начало формированию некоего искаженного представления о возможностях СКФ и излишней переоценки их «чудодейственности» применительно к разным химическим и физико-химическим процессам. В частности, СКФ до сих пор рассматриваются в качестве перспективных реакционных сред для реализации разнообразных органических реакций. «Это правда, но не вся правда!»

В докладе будет сделана попытка донести до слушателей информацию о наиболее востребованных качествах СКФ, а также о негативных моментах, сопутствующих применению СКФ. Основной упор будет сделан на рассмотрении примеров органических реакций или процессинге органических материалов.

Для улучшения восприятия этой информации, будут затронуты и обсуждены следующие вопросы:

- 1) Что такое «сверхкритический флюид» и в чём его основные отличия от традиционных жидкостей и газов?
- 2) Какие свойства СКФ и как химики используют или могут использовать на практике?
- 3) В каких современных технологических процессах наиболее востребованы СКФ?
- 4) Какие органические реакции или процессы уже реализованы в СКФ и в чём их особенность?

СТРУКТУРНЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ ФАКТОРА ИНАКТИВАЦИИ (HIBERNATION PROMOTING FACTOR) РИБОСОМЫ STAPHYLOCOCCUS AUREUS

Усачев К.С.¹, Аюпов Р.Х.¹, Хусаинов И.Ш.^{1,2}, Валидов Ш.З.¹, Юсупов М.М.^{1,2}

¹Казанский (Приволжский) федеральный университет, Казань, Россия

²Страсбургский университет, IGBMC, Страсбург, Франция

k.usachev@kpfu.ru

Синтез белка в клетке является одним из наиболее затратных по энергии процессов, поэтому в условиях стресса, в качестве одного из первых ответов клетки, происходит снижение трансляции. В бактериальных системах процесс снижения синтеза белка часто сопровождается образованием димеров

рибосом (или дисом). Этот процесс является одним из ключевых факторов обеспечивающих выживаемость клеток патогенных бактерий в неблагоприятных условиях, например, при действии антибиотика. Гибернация рибосом происходит за счет связывания небольших белков, выделяющихся в условиях стресса, с 70S рибосомами, которые в дальнейшем образуют 100S димер. Данный процесс может различаться у различных бактерий. В *E.coli* образование дисомы происходит при связывании с 70S рибосомой белков hibernation promoting factor (HPF, 95 а.о.) и ribosome modulation factor (RMF, 55 а.о.) [1]. Третий белок стресса YfiA (113 а.о.), имеющий гомологию по аминокислотной последовательности с белком HPF, при связывании с рибосомой, ингибирует связывание белка RMF, тем самым предотвращая димеризацию рибосом. Структурные исследования методом кристаллографии показали, что белки YfiA и HPF связываются с малой субчастицей рибосомы в сайтах связывания мРНК и тРНК, а белок RMF связывается рядом с последовательностью Шайна-Дальгарно малой субчастицы. В отличие от *E.coli*, процесс димеризации рибосом у *S. aureus* происходит в присутствии одного белка SaHPF (190 а.о.) [2]. N-концевой домен SaHPF, имеющий высокую гомологию по последовательности с белками HPF и YfiA из *E.coli*, также связывается в активных центрах рибосомы, в то время как C-концевой домен не имеет гомологии с белком RMF и располагается снаружи рибосомы образуя дополнительный белковый контакт путем димеризации C-концевых доменов с белком из второй рибосомы в димере. Структура 100S димера рибосом *S. aureus* была решена нами методом криоэлектронной микроскопии с разрешением 3,8 Å [3]. Однако разрешение в области контакта между C-концевыми доменами белка SaHPF составляло порядка 10 Å. Поэтому структура данного фрагмента была решена методом спектроскопии ЯМР высокого разрешения. Показано, что C-концевой домен присутствует в растворе в виде гомодимера с топологией $\beta 1-\alpha-\beta 2-\beta 3-\beta 4$. Интерфейс димера стабилизируется за счет нескольких взаимодействий: Thr171-Thr187, Ile173-Val162, Phe160-Tyr175, Phe160-Phe 160 (стэкинг взаимодействие между Phe160 из цепи А и Phe160 из цепи В). Полученная структура интерфейса димера белка SaHPF может являться потенциальной мишенью для препаратов против *S. aureus*.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ 16-14-10014

1. Y.S. Polikanov, G.M. Blaha, T.A. Steitz. *Science*, 2012, **336**, 915-918.
2. M. Ueta, C. Wada, A. Wada. *Genes Cells*, 2010, **15**, 43-58.
3. I. Khusainov, Q. Vicens, R. Ayupov, K. Usachev, A. Myasnikov, A. Simonetti, S. Validov, B. Kieffer, G. Yusupova, M. Yusupov, Y. Hashem. *The EMBO Journal*, 2017, **36**, 2073-2087

ИОННЫЕ РАВНОВЕСИЯ И ТЕЧЕНИЕ ЖИДКОСТИ В ЗАРЯЖЕННЫХ КОЛЛОИДНЫХ СИСТЕМАХ

Мадуар С.Р.^{1,2}, Виноградова О.И.^{1,2}

¹*Институт физической химии и электрохимии имени А.Н. Фрумкина РАН, Москва, Россия*

²*Московский государственный университет им. М.В.Ломоносова, Москва, Россия*

salmaid@ya.ru

Вблизи практически любой поверхности в растворе электролита образуется флуктуирующее облако ионов, компенсирующее её заряд, - диффузный электростатический слой (ДЭС). С его особыми свойствами связано множество явлений в коллоидных, электрохимических и биологических системах. С одной стороны, ДЭС существенно влияет на равновесные свойства системы, так как между частицами и поверхностями в растворе электролита возникают электростатические силы. Благодаря сравнительно большой протяженности ДЭС (до 100-500 нм) эти силы носят дальнедействующий характер и, тем самым играют определяющую роль в самоорганизации систем на данных масштабах. С другой стороны, наличие ДЭС определяет и динамические свойства электролитных систем. Так, ионы в ДЭС находятся в тепловом движении (по сравнению с фиксированными зарядами на поверхности) и могут реагировать на внешние поля, приводя к различным электрокинетическим явлениям, таким как электроосмос, электрофорез, диффузиоосмос и другие.

Ионные равновесия и структура ДЭС очень чувствительны к свойствам поверхности, но в подавляющем числе теоретических моделей предполагается, что поверхности однородны, непроницаемы, а поверхностный заряд латерально неподвижен. Безусловно, в связи с развитием методов синтеза, анализа и новых технологий требуется исследование новых, более сложных объектов, для которых указанные предположения неприменимы.

В данной работе рассматривается связь физико-химических свойств поверхности с ионными равновесиями, её электрокинетическими характеристиками и взаимодействием с другими объектами в растворе электролита. В частности, рассматриваются неоднородные поверхности, полупроницаемые