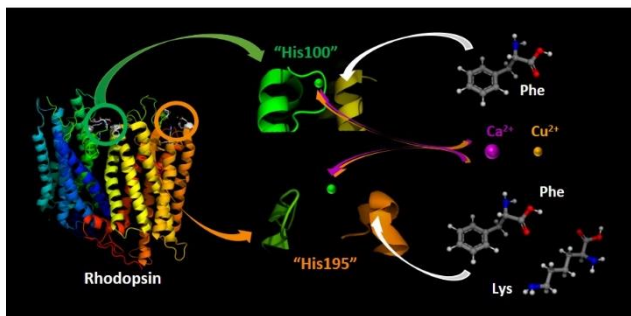


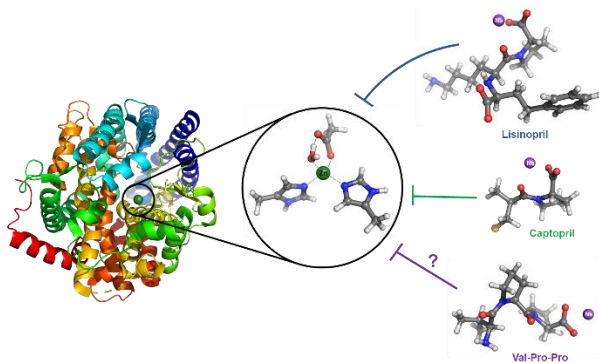
## DFT изчисления за изследване на химия и биохимия на метали

Институт по оптически материали и технологии „Акад. Й. Малиновски“  
Българска академия на науките

Николета Кирчева, Стефан Добрев, Силвия Ангелова



**Фигура 1:** Цинкът и неговата критична роля при заболяването *Retinitis pigmentosa* [1].



**Фигура 2:** Взаимодействие на инхибитори на ангиотензин I-конвертиращ ензим (Lisinopril, Captopril, Val-Pro-Pro) и HEXXH мотив на молекулно ниво[2].

### ❖ Описание

В съвременната химия изчисленията с теория на функционала на плътността (DFT) играят съществена роля за изясняване както на химичните, така и на физичните свойства на различни системи. В нашата група DFT изчисленията се използват за изследване на електронната структура на метални комплекси с малки лиганди/опростени модели на сложни лиганди - водни молекули и органични съединения, които имитират разтворители и биомолекулни мишени, например аминокиселини и пептиди. Изследванията ни са фокусирани върху биологично важни метали, както и върху тези, които имат конкурентна роля в биологичните системи. Цинкът е един такъв пример: вторият най-разпространен катион на преходните метали в човешкото тяло след желязото,

считан за жизненоважна съставка на протеини, включително ензими.

### ❖ Използване на инфраструктурата

*Ab initio* и DFT изчисленията са много надеждни при възпроизвеждането на структури на биологични системи и разкриват термодинамичните взаимодействия между компонентите на изследваните системи. Основният лимитиращ фактор е броят на базисните функции, които могат да бъдат изчислени. Широко разпространена методология е използването на опростени модели за аминокиселинните остатъци. Дори прилагайки такива модели, обикновено се нуждаем от изчислително време от порядъка на 4-8 седмици за едно такова изследване (40-50 задачи) при използване на мултипроцесорна работна станция. Осигуреният достъп до HPC инфраструктурата (суперкомпютър Авитохол) позволява едновременно и по-бързо изпълнение на много по-голям брой задачи. Използваният суперкомпютър се намира в HPC центъра на ИИКТ-БАН [3] и се поддържа от Националния център за високопроизводителни и разпределени изчисления НЦВРП), обект на националната пътна карта за научни инфраструктури (НПКНИ) [4].

### ❖ Резултати и бъдеща работа

С помощта на суперкомпютър Авитохол успяхме да получим данни за функцията на  $Zn^{2+}$  в два изследвани центъра (His100 и His195) на ключовия протеин родопсин и за свързването на Val-Pro-Pro (трипептид, получен от мляко, с предполагаема инхибираща активност срещу ACE) и две фармацевтични лекарства (Captopril и Lisinopril) към HEXXH мотив на ACE. Екипът ще започне нова задача, а именно изследването на свързването на сребро с биомолекули, което е причина за широко известната му антибактериална активност.

1. <https://doi.org/10.1021/acs.inorgchem.0c02664>
2. <https://doi.org/10.1016/j.bpc.2021.106626>
3. <http://www.iict.bas.bg/avitohol/>
4. <http://nchdc.acad.bg/>