

## ЭФФЕКТИВНЫЙ ПОДХОД К ИССЛЕДОВАНИЮ ЭЛЕКТРОННО-КОНФОРМАЦИОННЫХ ВЗАИМОДЕЙСТВИЙ

П.А. Мамонов, П.М. Красильников, А.Б. Рубин

Биологический ф-т МГУ им. М.В. Ломоносова, Россия, 119991, Москва, Воробьевы горы, д.1, стр.12, +7 495 939 43 67, piton@erg.biophys.msu.ru

Актуальной задачей современной молекулярной биофизики является исследование структурно-функциональных отношений в белках. В частности значительный интерес представляет исследование конформационных механизмов регуляции активности белков, осуществляющих окислительно-восстановительные реакции. Традиционно задачи такого рода считаются областью применения молекулярного моделирования. Однако многие функциональные и адаптационные процессы в биомолекулах происходят за времена на порядки превышающие времена доступные для моделирования и в этом смысле являются редкими событиями. Для их моделирования необходимы искусственные приемы, позволяющие повысить их вероятность на временах доступных для моделирования. Одним из современных подходов к данной проблеме является метод метадинамики [1]. Данный метод позволяет моделировать маловероятные события в молекулярных системах, а также эффективно рассчитывать поверхности свободной энергии в пространстве произвольных степеней свободы молекулярной системы, называемых далее коллективными переменными. На сегодняшний день данный метод хорошо зарекомендовал себя в таких областях как моделирование фазовых переходов в конденсированных средах, моделирование сворачивания полипептидов, исследование конформационной подвижности сложных молекул. В нашей работе мы впервые используем данный метод для исследования электронно-конформационных взаимодействий, сопровождающих модельную окислительно-восстановительную реакцию между ионами железа  $Fe^{2+}$  и  $Fe^{3+}$  в водном растворе [2]. С этой целью мы применяем метод метадинамики, используя в качестве коллективной переменной энергию сродства к электрону участников реакции. Анализируя результаты работы алгоритма мы идентифицируем пространственные степени свободы исследуемой системы, участвующие в активационном процессе, а также описываем сам активационный процесс. Полученные результаты исследования простой модельной системы находятся в количественном согласии с экспериментальными наблюдениями и дают адекватную физическую картину структурных изменений в водном комплексе железа, сопровождающих активационный процесс. Мы полагаем, что предлагаемая методика может оказаться эффективным инструментом исследования механизмов конформационной регуляции окислительно-восстановительных процессов в белках.

### Литература.

1. A.Laio, F.L.Gervasio Rep. Prog. Phys. 71, 126601, 2008.
2. J.Silverman, R.W.Dodson J. Phys. Chem. 57, 846, 1952.