

# РОЛЬ КОНФОРМАЦИОННЫХ ИЗМЕНЕНИЙ В МОЛЕКУЛАХ БЕЛКОВ ПЛАСТОЦИАНИНА И ЦИТОХРОМА f В КИНЕТИКЕ ИХ СВЯЗЫВАНИЯ

Федоров В.А., Хрущев С.С., Коваленко И.Б.

Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, биологический ф-т, кафедра биофизики, Россия, 119991, Москва, Ленинские горы 1, стр. 12

Белок-белковые взаимодействия лежат в основе большинства биологических процессов. Компьютерное моделирование динамики связывания белков дает важную информацию для понимания механизмов их функционирования. Одной из основных характеристик любого биологического процесса является константа скорости его протекания. Для изучения процессов диффузии и образования комплексов белков с успехом применяется метод броуновской динамики [Ermak, McCammon, 1978]. Подход броуновской динамики используется для описания движения молекул белка, при этом каждая белковая молекула рассматривается как отдельное твердое тело, совершающее хаотическое движение под действием молекул растворителя.

Целью данной работы является исследование влияния конформационных изменений в белках на скорость их сближения на пути формирования комплекса. В качестве модельных объектов были выбраны электрон-транспортные белки пластоцианин и цитохром f. Для моделирования взаимодействия данной пары белков нами используется метод броуновской динамики, в котором белки рассматриваются как твердые тела в неявно заданном растворителе. Конформация цитохрома f была взята из структуры 2PCF во всех расчетах оставалась неизменной. Для белка пластоцианина был исследован набор конформаций, полученных экспериментальными методами рентгеноструктурного анализа и ядерного магнитного резонанса в растворе, а также конформации, полученные расчетными методами молекулярной динамики.

Были проведены расчеты броуновской динамики с учетом электростатических взаимодействий и без них. Было показано, что изменение конформации пластоцианина не оказывает существенного влияния на дальнедействующие электрокинетические взаимодействия, однако играет существенную роль при сближении до расстояний контакта.

Работа поддержана грантами РФФИ №14-04-00326-а и 14-04-31686 мол\_а.

## Литература.

1. Хрущев С.С., Абатурова А.М., Дьяконова А.Н., Устинин Д.М., Зленко Д.В., Федоров В.А., Коваленко И.Б., Ризниченко Г.Ю., Рубин А.Б. Моделирование белок-белковых взаимодействий с применением программного комплекса многочастичной броуновской динамики ProKSim // Компьютерные исследования и моделирование, 2013, т. 5, № 1, с. 47-64
2. Коваленко И.Б., Хрущев С.С., Устинин Д.М., Федоров В.А., Мамонов П.А., Зленко Д.В., Ризниченко Г.Ю., Рубин А.Б. Реконструкция молекулярных процессов в живой клетке // Суперкомпьютерные технологии в науке, образовании и промышленности. Альманах, Издательство Московского университета, Москва, с. 232-978