

МЕХАНИЗМ РЕАКЦИИ ГИДРОЛИЗА ГУАНОЗИНТРИФОСФАТА В БЕЛКОВОМ КОМПЛЕКСЕ ARL3-RP2 ПО РЕЗУЛЬТАТАМ МОЛЕКУЛЯРНОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ

Хренова М.Г., Коц Е.Д., Миронов В.А., Григоренко Б.Л.

Химический факультет МГУ имени М.В. Ломоносова, Москва, Ленинские Горы 1/3

В работе обсуждается механизм гидролиза гуанозинтрифосфата в белковом комплексе Arl3-RP2, полученный в рамках комбинированного метода квантовой механики / молекулярной механики. В процессе реакции ключевую роль играет аминокислотный остаток Gln71, участвующий в переносе протона от каталитической молекулы воды на фосфатную группу, отделяющуюся в процессе гидролиза; в ходе реакции функциональная группа переходит в таутомерную имидную форму. Активный сайт рассматриваемого белкового комплекса имеет много общего с другой ГТФазой Ras-GAP, однако, окружение ключевого остатка глутамина отличается значительно, что приводит к различиям в энергетических профилях реакции и структурах интермедиатов.

Работы выполняются в рамках проекта РФФИ № 15-33-20579 мол_а_вед.