

РЕКОНСТРУКЦИЯ РЕШЕТОК, СФОРМИРОВАННЫХ ТРАНСМЕМБРАННЫМИ ФОТОРЕЦЕПТОРАМИ АРХЕБАКТЕРИЙ, МЕТОДАМИ КОМПЬЮТЕРНОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ

Орехов Ф.С., Steinhoff Н.-J.¹, Engelhard М.², Шайтан К.В.³

Московский физико-технический институт (государственный университет)

¹Физический факультет, университет г. Оснабрюк, Германия

²Институт молекулярной физиологии им. М. Планка, г. Дортмунд, Германия

³Биологический факультет, Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, г. Москва, Россия

Хемо- и фототаксисные системы позволяют микроорганизмам реагировать на градиенты питательных веществ, токсинов, света и т.п. Системы таксиса включают: (1) трансмембранные рецепторы, организованные в крупные (до нескольких тысяч отдельных белков) кластеры, (2) решетку, состоящую из киназы CheA и белка-адаптора CheW и присоединенную к цитоплазматическим участкам рецепторов, и (3) подвижного регуляторного белка CheY, который подвергается фосфорилированию киназой CheA и доставляет сигнал к клеточному мотору, изменяя, в конечном счете, режим движения микробной клетки.

В настоящей работе исследуется структурная организация фототаксисных комплексов *Natronomonas pharaonis*. Рецепторы и рецепторные комплексы, входящие в состав таксисных систем, представляют собой длинные димерные белки.

Индивидуальные димерные рецепторы формируют «тримеры из димеров», которые, в свою очередь, собираются в крупные трансмембранные кластеры. Такая организация важна для уникальных свойств, проявляемых системами таксиса: многократного усиления и интеграции сигнала, стабильности к различного рода флуктуациям. Кристаллографический анализ является важнейшим источником данных о трехмерной структуре отдельных доменов фоторецепторов. Тем не менее значительная длина рецепторов (35 нм) и их амфифильная природа не позволяют до настоящего времени получить кристаллы полноразмерных комплексов сенсорного родопсина и белка-передатчика (NpSRII:NpHtrII). В нашей работе мы использовали различные подходы молекулярного моделирования (моделирование по гомологии, белок-белковый докинг, классическая и крупно-зернистая молекулярная динамика) для интеграции имеющихся экспериментальных данных рентгеноструктурного анализа и данных крио-электронной микроскопии в молекулярную модель организации трансмембранной решетки фоторецепторов NpSRII:NpHtrII. Данная модель позволяет объяснить преимущественно полярную локализацию рецепторных кластеров в клетках, а также предлагает молекулярный механизм аллостерического усиления сигнала на уровне трансмембранной решетки рецепторов.