

МОДЕЛИРОВАНИЕ БЕЛОК-ЛИПИДНОГО КОМПЛЕКСА РОТОРА АТФ-СИНТАЗЫ

Новицкая О.С., Буслаев П.И., Гушин И.Ю.

Московский физико-технический институт,
Россия, 141701, г. Долгопрудный, Институтский пер., 9.,
E-mail: ivan.gushchin@phystech.edu

АТФ-синтаза представляет собой крупный мультибелковый ферментативный комплекс, синтезирующий АТФ за счет электрохимического потенциала на биологической мембране [1]. АТФ-синтазы были обнаружены во всех царствах живых организмов, в частности, в клеточных мембранах бактерий, в митохондриях и хлоропластах эукариот. В состав комплекса обычно входят две субъединицы, одна из которых находится в растворе, а вторая – в липидном бислое. Мембранная часть, также называемая F_0 , включает образуемое 8-15 c -субъединицами роторное c -кольцо, вращающееся в липидном окружении во время процесса синтеза молекул АТФ [2]. Несмотря на давний интерес к АТФ-синтазе, только недавно были получены атомные структуры высокого разрешения отдельных c -колец и всего комплекса. При этом, положения липидных молекул внутри c -колец обычно плохо различимы.

В данной работе нами был рассмотрен процесс сборки внутри липидной мембраны c -колец АТФ-синтазы из шпината. Система моделировалась методом молекулярной динамики при помощи крупнозернистого силового поля Martini, при этом процесс сборки занимал 200-2000 нс. В результате сборки получался остающийся стабильным на протяжении последующего моделирования белок-липидный комплекс, включающий непосредственно 14 c -субъединиц и 23-25 липидных молекул. Полученные положения липидов хорошо соотносятся с экспериментальными данными.

Литература

1. Walker J.E. The ATP synthase: the understood, the uncertain and the unknown // *Biochem. Soc. Trans.* том 41, номер 1, год 2013, стр. 1-16
2. Kühlbrandt W., Davies K.M. Rotary ATPases: A New Twist to an Ancient Machine // *Trends Biochem. Sci.* том 41, номер 1, год 2016, стр. 106-116