

МОДЕЛИРОВАНИЕ ОБРАЗОВАНИЯ КОМПЛЕКСА БЕЛКОВ ЦИТОХРОМА С И ЦИТОХРОМА С1 ИЗ МЛЕКОПИТАЮЩИХ И ДРОЖЖЕЙ МЕТОДОМ БРОУНОВСКОЙ ДИНАМИКИ

Абатурова А.М., Коваленко И.Б., Федоров В.А., Рубин А.Б.

Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, биологический ф-т, кафедра биофизики, Россия, 119991, Москва, Ленинские горы 1, стр. 12, +7(495)9390289, abaturova@list.ru

При дыхании белок цитохром с (цит.с) переносит электроны в межмембранном пространстве митохондрии от цитохрома с1 – субъединицы цитохромного bc₁ комплекса, к цитохром с оксидазе. Дыхательные мембранные белки у млекопитающих, грибов и растений собраны в более крупные структуры – респирасомы.

Для исследования процесса образования предварительных комплексов водорастворимой части цитохрома с1 (цит.с1) и цит.с. млекопитающих и дрожжей мы промоделировали их взаимодействие программой броуновской динамики ProKSim [1]. Мы использовали PDB координаты атомов цит.с1 и цит.с из быка 1BGY и 6ff5, из быка и лошади 1BGY и 3O1Y, комплекса из дрожжей 3CX5. Комплекс белков считался образованным, если энергия его по модулю была больше 7 кТ для цит.с1 из быка и 9 кт из дрожжей.

Мы анализировали выборку из 20000 таких энергетически-выгодных случайно отобранных конфигураций комплексов методом кластерного анализа. Для всех рассмотренных видов организмов полученные структуры предварительных комплексов могли быть отнесены к двум большим кластерам. В первом кластере ориентация цит.с похожа на ориентацию в экспериментально определенном комплексе 3CX5, но расстояние между атомами железа в этом кластере больше (24–30 Å против 17.4Å в экспериментальном комплексе). Во втором комплексе расстояние между атомами железа было 35–40Å, ориентация не похожа на таковую в экспериментальной структуре. У цит.с1 в местах связывания цит.с имеется единая область отрицательного электростатического потенциала, цит.с в месте связывания имеет область положительного потенциала.

Работа выполнена с использованием оборудования Центра коллективного пользования сверхвысокопроизводительными вычислительными ресурсами МГУ имени М.В. Ломоносова.

Литература.

1. Хрущев С.С. и др. Моделирование белок-белковых взаимодействий с применением программного комплекса многочастичной броуновской динамики ProKSim // Компьютерные исследования и моделирование, том 5, № 1, 2013, 47-64.