

## ИНТЕРПРЕТАЦИЯ И МОДЕЛИРОВАНИЕ СПЕКТРОВ КРУГОВОГО ДИХРОИЗМА ЦИТОХРОМ С ОКСИДАЗЫ

Дюба А.В., Красильников П.М., Шаронов Ю.А.

МГУ им.Ломоносова, Биологический факультет, кафедра биофизики,  
Россия, 119992, Москва, Воробьевы горы, тел.(495) 939-1116, факс 939-1115,  
E-mail: dyubon@mail.ru

Спектроскопия кругового дихроизма (КД) является удобным и чувствительным экспериментальным методом изучения структуры и механизма работы гемсодержащих ферментов. В состав таких ферментов входят компоненты (гем или система из нескольких гемов), обладающие неодинаковым поглощением правополяризованного и левополяризованного света в области Core (380-480 нм). Это свойство обусловлено отсутствием у этих компонентов центра инверсии и плоскости симметрии.

В настоящей работе предлагается модель, позволяющая на основе спектров кругового дихроизма выделить структурные особенности гемов и их взаимного расположения. Нами рассмотрены спектры КД цитохром с оксидазы — одного из ключевых ферментов аэробного дыхания, содержащего два гема — высокоспиновый  $a_3$  и низкоспиновый  $a$ . Интерпретация спектров включает в себя:

1. Одновременное разложение на компоненты спектров КД и поглощения фермента. При этом в этих спектрах совпадают число полос, а также положение и полуширина каждой полосы. Различными остаются амплитуды полос.

2. Моделирование спектров КД на основе классической теории оптической активности и КД [1]. Основные предположения модели:

А) Система представляет собой набор взаимодействующих точечных осциллирующих электрических и магнитных диполей;

Б) Локальное поле вдоль каждого диполя однородно и складывается из поля Лорентца и поля, наведенного другими диполями;

В) Частотная зависимость поляризуемости осцилляторов имеет вид лорентциана с одинаковой для всех осцилляторов полушириной.

Входными параметрами для модели являются направления электрических дипольных моментов (по данным рентгеноструктурного анализа белка), поляризуемости осцилляторов и полуширина линий поляризуемости (из спектра поглощения). На выходе модель выдает рассчитанный спектр КД для заданной системы диполей.

Предлагаемая модель позволяет не только интерпретировать зарегистрированные спектры ферментов с известной трехмерной структурой, но и предсказывать взаимное расположение оптически активных компонентов ферментов с неизвестной структурой.

### Литература.

1. *Applequist, J., R.Sundberg, K., Olson, M. L., and Weiss, L. C.* A normal mode treatment of optical properties of a classical coupled dipole oscillator system with Lorentzian band shapes // *J. Chem. Phys.* том 70, 1979. Стр. 1240-1246, 1979