

НАПРАВЛЕННОСТЬ ДВИЖЕНИЯ МОЛЕКУЛ ЦИТОХРОМА С ВБЛИЗИ III ДЫХАТЕЛЬНОГО КОМПЛЕКСА ПРИ ТРАНСПОРТЕ ЭЛЕКТРОНОВ В МОДЕЛИ БРОУНОВСКОЙ ДИНАМИКИ

Абатурова А.М., Ризниченко Г.Ю.

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

Небольшой (около 12 кДа) водорастворимый белок цитохром С (цитС) переносит электроны в электрон-транспортной цепи митохондрий между III и IV дыхательными комплексами и является незаменимым переносчиком. Для расширения представлений, получаемых экспериментальными методами об это процессе необходимо использовать компьютерное моделирование. В исследованиях [1] по результатам докинга предполагается, что у активной субъединицы димера III (III₂) и IV дыхательных комплексов имеется по 2 сайта связывания цитС – основной проксимальный, где происходит передача электрона, и дистальный, непродуктивный. Наличие дистальных сайтов за счет ограничения диффузии цитС должно облегчать транспорт электрона.

В настоящей работе в программе броуновской динамики ProKSim [2] была построена модель диффузии цитС (pdb ID 3O1Y) в участке кристы митохондрии 120x300x300Å, содержащем фиксированный в мембране димер III дыхательного комплекса (PDB ID 1BGY) при ионной силе 130 мМ, рН 7. Начальное положение цитС во всех численных экспериментах было одинаково, находилось на границе III₂ со стороны IV в респирасоме 5GPN, ориентация соответствовала электростатически выгодной. Было проведено 9000 численных экспериментов продолжительностью 50 мкс.

При анализе вероятности нахождения молекул цитС вблизи III₂ были получены максимумы около двух субъединиц цитохромов С1, соответствующие проксимальному сайту в работе [1] и максимумы вдоль линии, начинающейся из начального положения цитС и не достигающей до проксимального сайта. В течение 5 мкс цитС преимущественно находился около начального положения и активной субъединицы III₂, затем вероятность нахождения цитС возрастала в области неактивной субъединицы. Это обеспечивает отток цитС от активной субъединицы III₂ и освобождает место для прихода следующих молекул цитС от IV. Результаты моделирования показывают оптимальность расположения IV относительно III₂ для быстрого транспорта электрона в респирасоме.

Исследование выполнено в рамках научного проекта государственного задания МГУ №121032500060-0.

Литература.

1. Gonzalo Pérez-Mejías et al. 2019, DOI: 10.1016/j.csbj.2019.05.002
2. Хрущев С.С. и др. 2013, 47-64., DOI: 10.20537/2076-7633-2013-5-1-47-64