

# ИССЛЕДОВАНИЕ МЕХАНИЧЕСКИХ СВОЙСТВ БЕЛКОВ МЕТОДОМ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ

Глякина А.В., Галзитская О.В.<sup>1</sup>, Балабаев Н.К.

Институт математических проблем биологии РАН, Россия, 142290, г. Пущино, ул.  
Институтская, д. 4, тел. 8(4967)73-38-19, e-mail: quark777@gambler.ru

<sup>1</sup> Институт белка РАН, Россия, 142290, г. Пущино, ул. Институтская, д. 4.

Белки играют важную роль в различных биологических процессах. В то же время они являются весьма перспективными структурными и функциональными элементами будущих наноприборов. Функциональные возможности макромолекул в значительной степени определяются их механическими свойствами.

Объектами исследования были два иммуноглобулинсвязывающих домена белков L и G. Оба этих белка состоят из двух концевых  $\beta$ -шпилек (N- и C-шпильки) и  $\alpha$ -спирали между ними. Белки имеют одинаковые пространственные структуры (среднеквадратичное отклонение выравненных C $\alpha$ -атомов этих белков составляет 1.38 Å), но по аминокислотной последовательности идентичны всего лишь на 15%.

В настоящей работе ставится вопрос о сравнении механических свойств этих двух белков. Для этого методом молекулярной динамики (силовое поле AMBER-99 [1]) с использованием явной модели растворителя [2] моделировался процесс разворачивания белков путем растяжения их за концы. Проводилось два типа вычислительных экспериментов. В одном случае белки растягивались за концы с постоянной силой, а в другом – с постоянной скоростью.

Было обнаружено, что как при больших силах ( $F > 800$  пН), так и при больших скоростях растяжения ( $v > 0.0625$  Å/пс) средние времена разворачивания и, соответственно, средние максимальные силы реакции, возникающие при разворачивании, для белков L и G оказались близкими. С уменьшением силы и скорости растяжения для разворачивания белка G в среднем требуется большее время и возникает большая сила реакции, чем для белка L. Это говорит о том, что в диапазоне малых скоростей и сил растяжения белок G механически более стабилен по сравнению с белком L. В тоже время, величина прикладываемой силы не изменяет пути механического разворачивания белков L и G [3].

## Литература

1. Wang J., Cieplak A., Kollman P.A. How Well a Restricted Electrostatic Potential (RESP) Model Perform in Calculating Conformational Energies of Organic and Biological Molecules? // *J. Comp. Chem.*, **21**, 2000, 1049-1074.
2. Lemak A.S., Balabaev N.K. A Comparison between Collisional Dynamics and Brownian Dynamics. // *Mol. Simul.*, **15**, 1995, 223-231.
3. Glyakina A.V., Balabaev N.K., Galzitskaya O.V. Mechanical unfolding of proteins L and G with constant force: similarities and differences. // *J. Chem. Phys.*, **131**, № 045102, 2009, 1–10.