

ИДЕНТИФИКАЦИЯ ВЗАИМНОГО РАСПОЛОЖЕНИЯ ПАРЫ БЕЛКОВ ПЛАСТОЦИАНИНА И ЦИТОХРОМА F, СООТВЕТСТВУЮЩЕГО СОСТОЯНИЮ ФУНКЦИОНАЛЬНО АКТИВНОГО КОМПЛЕКСА

Федоров В.А., Хрущев С.С., Коваленко И.Б.

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

Формирование короткоживущих белок-белковых комплексов является одним из ключевых процессов в большинстве биологических систем. Молекулярное моделирование событий, происходящих при формировании физиологически активного комплекса, позволяет глубже понять физические основы жизнедеятельности.

Белки сближаются в процессе диффузии, и за счет электростатических взаимодействий происходит образование диффузионно-столкновительного комплекса [1]. Диффузионно-столкновительный комплекс переходит в финальный (физиологически активное состояние) за счет гидрофобных, электростатических и Ван-дер-Ваальсовых взаимодействий между белками. При этом белки проходят ряд метастабильных состояний с различными взаимными ориентациями молекул друг относительно друга, из которых с большей или меньшей вероятностью происходит образование финального комплекса. Нашей задачей является установление условий, определяющих переход к таким взаимным расположениям и конформациям белковых молекул, при которых формируется финальный комплекс. Это позволит определить критерии образования белок-белкового комплекса в модели, установить пути перехода между метастабильными состояниями и их характерные времена.

Работа поддержана грантами РФФИ № 15-07- 08927, № 14-04-00302 и № 15-04-08681.

Вычислительные эксперименты проводились с использованием суперкомпьютера Ломоносов в Суперкомпьютерном центре Московского государственного университета имени М.В.Ломоносова.

Литература.

1. Хрущев С.С., Абатурова А.М., Дьяконова А.Н., Федоров В.А., Устинин Д.М., Коваленко И.Б., Ризниченко Г.Ю., Рубин А.Б. Моделирование взаимодействий белков фотосинтетической электрон-транспортной цепи фотосинтеза методом броуновской динамики // Биофизика, 2015, т. 60, № 2, с. 270-292.
2. Хрущев С.С., Абатурова А.М., Дьяконова А.Н., Устинин Д.М., Зленко Д.В., Федоров В.А., Коваленко И.Б., Ризниченко Г.Ю., Рубин А.Б. Моделирование белок-белковых взаимодействий с применением программного комплекса многочастичной броуновской динамики ProKSim // Компьютерные исследования и моделирование, 2013, т. 5, № 1, с. 47-64