

ИССЛЕДОВАНИЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ФЕРРЕДОКСИНА И ФНР МЕТОДОМ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ

Зленко Д.В., Дьяконова А.Н., Хрущёв С.С., Коваленко И.Б., Рубин А.Б.

МГУ, биологический ф-т, каф. биофизики. 119992, Москва, Ленинские горы, 1/12.
Тел. (495)9394367, e-mail: dvzlenko@gmail.com

Основная цель данной работы состоит в моделировании методами молекулярной динамики (МД) процесса перехода предварительного комплекса белков ферредоксина и ферредоксин:НАДФ⁺- редуктазы (ФНР) в финальный и оценке константы скорости этой реакции. Эти белки - участники электрон-транспортной цепи (ЭТЦ) фотосинтеза. Ранее была создана броуновская модель взаимодействия этих белков, в которой были оценены константы скорости образования предварительного комплекса [1]. Объединение броуновской и молекулярной динамики даст полное представление о процессе образования белкового комплекса.

Координаты атомов молекул исследуемой пары белков были взяты из структуры 1EWY. Топологии молекул были построены в силовом поле CHARMM, для расчетов МД использован пакет программ GROMACS. Параметры атомов для железо-серного кластера, кофактора ферредоксина, были взяты из [2]. Параметры ФАД, кофактора ФНР, были скомбинированы из параметров ФМН [3], пиррофосфата [4] и стандартного для силового поля CHARMM рибоаденозина.

На начальном этапе работы были созданы топологии исследуемых белков, затем собраны модели молекул ферредоксина, ФНР и их комплекса в воде при концентрации NaCl 150 мМ. После оптимизации геометрии, были выполнены релаксационные расчеты молекулярной динамики в периодических граничных условиях с шагом интегрирования 1 фс, длиной 100 пс. Уравнения движения были выбраны в форме Ланжевена, использовался комбинированный термостат, для расчета электростатики использовали метод PME. Расчеты МД проведены на суперкомпьютере Ломоносов, НИВЦ МГУ. Полученные усредненные конформации будут использованы для построения моделей частиц для броуновской динамики. Финальные координаты релаксационных расчетов в дальнейшем будут использованы для моделирования процесса образования финального комплекса.

Работа поддержана грантом РФФИ 12-07-33036-мол_a_вед.

Литература

1. Kovalenko I.B., Diakonova A.N., Abaturova A.M., Riznichenko G.Yu., Rubin A.B. Direct computer simulation of ferredoxin and FNR complex formation in solution // Phys. Biol. V.7, №3. 026001.
2. Chang C.H., Kim K. Density functional theory calculation of bonding and charge parameters for molecular dynamics studies of [FeFe]-hydrogenases // J. Chem. Theory Comput. V. 5, 2009. Pp. 1135-1145
3. Freddolino P.L., Dittrich M., Schulten K. Dynamic switching mechanisms in LOV1 and LOV2 domains of plant phototropins // Biophys. J. V. 91, 2006. Pp. 3630-3639.
4. Pavelites J.J., Gao J., Bash P.A., Mackerell A.D. Jr. A molecular mechanics force field for NAD⁺, NADH, and the pyrophosphate groups of nucleotides // J. Comp. Chem. V. 18, 1997. Pp. 221-239