

РАСЧЕТ КИНЕТИКИ ОБРАЗОВАНИЯ КОМПЛЕКСА ПЛАСТОЦИАНИНА С ЦИТОХРОМОМ f МЕТОДОМ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ

Федоров В. А., Хрущев С. С., Коваленко И. Б., Ризниченко Г.Ю., Рубин А.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

В настоящее время развитие молекулярной биофизики и технологий молекулярного моделирования сделало актуальным использование методов молекулярной динамики для изучения динамики макромолекул и кинетики их взаимодействия. Метод молекулярной динамики позволяет детально описать микроскопическую картину внутренней подвижности макромолекулы. В его основе лежит расчет классических (ньютоновских) траекторий движения макромолекулы в фазовом пространстве координат и импульсов ее атомов, когда молекула рассматривается как система взаимодействующих классических частиц.

В качестве модельного объекта были выбраны белки фотосинтетической электрон-транспортной сети пластоцианин, растворимый белок, локализованный в люменальном пространстве тилакоида, и цитохром f , часть цитохромного b_6f комплекса. Молекулы пластоцианина окисляют цитохром f и восстанавливают реакционный центр фотосистемы 1, диффундируя в люминальном пространстве на довольно большие расстояния (сотни нм), перенося электроны между гранальными и стромальными областями в тилакоидах.

Моделирование образования комплекса белков проводится в два этапа. На первом этапе при помощи модели броуновской динамики исследуется процесс диффузии белков с учетом дальнедействующих электростатических взаимодействий [2], их сближение и взаимная ориентация при образовании предварительного комплекса. Структуры комплексов, полученные на первом этапе, используются в качестве входных данных для расчетов молекулярной динамики в явно заданном растворителе. Для ускорения молекулярно-динамических расчетов используется прием перераспределения масс по Г. Берендсену [1] с использованием параллельных алгоритмов для суперкомпьютеров и графических процессоров. На втором этапе изучается трансформация полученных предварительных комплексов в финальный комплекс.

Работа поддержана грантами РФФИ № 12-07-33036 и № 12-04-31839 и CUDA Center of Excellence МГУ. Вычисления производились на суперкомпьютере Московского университета «Ломоносов».

Литература

1. K. A. Feenstra, B. Hess, H. J. C. Berendsen. Improving Efficiency of Large Time-Scale Molecular Dynamics Simulations of Hydrogen-Rich Systems. - J Comput Chem, 1999. 20:786–798.
2. Ризниченко Г. Ю., Коваленко И. Б. Многочастичное моделирование взаимодействия белков в фотосинтетической мембране // Биофизика, 2011, 56(5): 775-786.