

РОЛЬ ЭЛЕКТРОСТАТИЧЕСКИХ ВЗАИМОДЕЙСТВИЙ В ОБРАЗОВАНИИ ПРЕДВАРИТЕЛЬНЫХ КОМПЛЕКСОВ БЕЛКОВ ПЛАСТОЦИАНИНА И ЦИТОХРОМА *f*, БАРНАЗЫ И БАРСТАРА

Абатурова А.М., Хрущёв С.С., Коваленко И.Б., Ризниченко Г.Ю., Рубин А.Б.

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

Моделирование связывания белков является важным этапом для понимания процесса их функционирования. С помощью компьютерной программы многочастичной броуновской динамики *ProKSim* [1] мы промоделировали образование предварительных комплексов двух пар небольших глобулярных белков. Белки пластоцианин (*Пц*) и цитохром *f* (*Цит*) являются компонентами фотосинтетической электрон-транспортной цепи растений. Барназа (*Бн*) принадлежит к классу бактериальных рибонуклеаз, барстар (*Бс*) – её ингибитор.

В программе *ProKSim* моделировалось броуновское движение молекул с учётом электростатических взаимодействий. Координаты атомов белков мы взяли из *Protein Data Bank* для комплексов: *Пц* и *Цит* — 2PCF, *Бн* и *Бс* — 1BGS. Рассматривались молекулы, минимальное расстояние от атомов которых до атомов их белков-партнёров было меньше 5 Å (в случае без электростатических взаимодействий) или энергия электростатического притяжения была меньше –кТ.

Мы разбили пространство вокруг молекул белков *Цит* и *Бн* на ячейки с шагом 1 Å и получили распределение вероятности положения центра масс *Пц* и *Бс* относительно молекул белков-партнёров. При моделировании без учёта электростатических взаимодействий вероятности распределены равномерно в пространстве около молекул *Цит* и *Бн*.

При моделировании с учётом электростатических взаимодействий для *Пц* наблюдается один максимум вероятности положения центра масс, соответствующий экспериментально определённому положению молекулы *Пц* в комплексе с *Цит*. Для *Бс* наблюдается два максимума распределения вероятности. Один находится вблизи экспериментально определённого положения молекулы *Бс* в комплексе с *Бн*. Второй максимум, как и в работе [2], находится около Lys 66, далеко от сайта связывания.

Работа поддержана грантами РФФИ 12-04-31839-мол_а и 12-07-33036-мол_а_вед.

Литература

1. Хрущёв С.С., Абатурова А.М., Устинин Д.М., Громов П.А., Коваленко И.Б., Грачёв Е.А., Ризниченко Г.Ю. Програмное обеспечение *ProKSim* для моделирования взаимодействия белков с помощью метода многочастичной броуновской динамики // Математика. Компьютер. Образование. Сб. научных тезисов, 2012. Стр. 44.
2. Spaar A, Dammer C, Gabdoulline RR, Wade RC, Helms V. Diffusional encounter of barnase and barstar // *Biophys. J.* **90**, 2006,1913-1924.