

ИССЛЕДОВАНИЕ СТРУКТУРЫ БАКТЕРИАЛЬНОЙ ЛЮЦИФЕРАЗЫ *Vibrio harveyi* МЕТОДАМИ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ

Суковатый Л.А., Деева А.А., Немцева Е.В.

ФГАОУ ВО Сибирский федеральный университет, г. Красноярск, пр. Свободный 79,
e-mail: suk-lev@yandex.ru

Структура белковых макромолекул может быть подвержена различным пространственным изменениям, как незначительным, вызванным тепловыми флуктуациями, так и глобальным, связанным с функционированием белка: формирование фермент-субстратного комплекса, освобождение продуктов реакции и т.д. Но в то же время, предполагается, что для формирования необходимой конфигурации активного центра и обеспечения каталитических функций фермента важна жесткость структуры белка [1].

С точки зрения структурно-функциональных связей особый интерес для изучения представляет бактериальная люцифераза *Vibrio harveyi*. Данный фермент, как и его структурные аналоги: алканосульфонат монооксигеназа *Escherichia coli* и длинноцепочечная монооксигеназа *Geobacillus thermodenitrificans*, относится к семейству флавин-зависимых монооксигеназ. Все три белка имеют схожую пространственную структуру, а также катализируют схожие биохимические реакции, но только бактериальная люцифераза может катализировать превращение энергии химической реакции в свет, то есть выполняет функцию биолюминесценции. На данный момент, вопрос о том, какие структурные особенности люциферазы позволяют осуществлять катализ уникальной биохимической реакции, не изучен в полной мере.

В данной работе в программе NAMD, была проведена оценка жесткости белковых структур по результатам расчетов, выполненных методом молекулярной динамики. Таким образом был проведен сравнительный анализ параметра среднеквадратичной флуктуации C_{α} -атомов цепи для люциферазы без субстрата, люциферазы, связанной с восстановленным флавиномононуклеотидом, и ее структурных аналогов.

Сравнение значений флуктуации важных аминокислотных остатков показало, что при связывании люциферазы с субстратом уменьшается подвижность мобильной петли и аминокислот на входе в активный центр и увеличивается подвижность аминокислотных остатков, стабилизирующих интермедиаты реакции. Помимо этого установлено, что структурные аналоги характеризуются большей подвижностью функционально важных аминокислотных остатков по сравнению с люциферазой.

Литература.

1. Финкельштейн, А. В., Птицын, О. Б. Физика белка: курс лекций с цветными и стереоскопическими иллюстрациями и задачами : учеб. пособие / А. В. Финкельштейн, О. Б. Птицын. – 4-е изд. испр. и доп. – Москва : КДУ, 2012. – 524 с.