

ПРЯМОЕ КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ЗАВИСИМЫХ ОТ ФЕРРЕДОКСИНА ЭЛЕКТРОННЫХ ПОТОКОВ

Дьяконова А.Н., Коваленко И.Б., Ризниченко Г.Ю.

Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова,
Биологический ф-т, каф. Биофизики,
Россия, 119992, Москва, Ленинские горы, МГУ,
Тел. (495)9390289, e-mail: alex.diakonova@gmail.com

Небольшой железосерный белок ферредоксин (Фд) опосредует реакции электронного переноса в разнообразных метаболических реакциях. Помимо циклического и нециклического транспорта в электрон-транспортной цепи (ЭТЦ) фотосинтеза, Фд участвует в азотном и серном обмене и реакциях выделения водорода. В ЭТЦ основным партнером Фд является ферредоксин:НАДФ⁺-редуктаза (ФНР), переносящая электроны на НАДФ⁺ с образованием НАДФН. При этом, восстановленный фотосистемой I (ФСІ) Фд может передавать электроны на другие белки, включая гидрогеназу, нитритредуктазу, глутаматсинтазу и т.д. Благодаря ключевой роли Фд в анаболических процессах, понимание механизмов его регуляции имеет важное значение для экологии и биотехнологии.

Нашей задачей является создание прямой многочастичной модели акцепторной части ФСІ и переноса электронов на ФНР и гидрогеназу. Разработанный в нашей лаборатории метод позволяет моделировать случайное движение и электростатические взаимодействия сотен белков в объеме и компартментах клетки и исследовать кинетику их взаимодействия [1]. В модели молекулы белков представляют собой твердые тела, движущиеся под действием случайной силы и электростатической силы, создаваемой содержащимися в объеме заряженными молекулами (белками) и мембраной. На основании нашей модели мы способны определить ключевые для взаимодействия с другими белками аминокислотные остатки молекул и исследовать процессы переключения зависимых от Фд электронных потоков метаболизма, в том числе приводящего к образованию биоводорода потока на гидрогеназу.

Литература

1. *Riznichenko G.Yu., Kovalenko I.B., Abaturova A.M., Diakonova A.N., Ustinin D.M., Grachev E.A., Rubin A.B.* New direct dynamic models of protein interactions coupled to photosynthetic electron transport reactions // *Biophysical Reviews*, v. 2, № 3, 2001. Pp. 101-110.