

ПРЯМОЕ КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ pH СРЕДЫ И РЕДОКС-СОСТОЯНИЯ ПЛАСТОЦИАНИНА И ЦИТОХРОМА f НА КОНСТАНТУ ИХ СВЯЗЫВАНИЯ

Абатурова А.М., Громов П.А.¹, Коваленко И.Б., Ризниченко Г.Ю., Грачев Е.А.¹

Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова,
Биологический ф-т, каф. Биофизики,
Россия, 119992, Москва, Ленинские горы, МГУ,
Тел. (095)9390289, e-mail: abaturova@list.ru

¹Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, Физический ф-т,
Россия, 119992, Москва, Ленинские горы, МГУ

Транспорт электрона подвижным белком-переносчиком пластоцианином (Pc) в люмене тилакоида от цитохрома f цитохромного b₆f комплекса к фотосистеме I является одной из ключевых стадий электрон-транспортной цепи фотосинтеза. Pc высших растений является небольшим (10 кДа) отрицательно заряженным белком, в качестве редокс центра несет атом меди. Цитохром f является субъединицей цитохромного b₆f комплекса, в качестве редокс центра несет гем. Внемембранная часть цитохрома f (cyt_f) отрицательно заряжена, но в области связывания Pc имеет положительный заряд. Известно, что в образовании комплекса между Pc и cyt_f основную роль играют электростатические взаимодействия.

Ранее [1] нами была разработана модель прямого компьютерного моделирования образования комплекса между двумя белками. Были оценены значения параметров модели для образования комплекса между окисленным Pc и восстановленным cyt_f при pH раствора 7. В данной работе мы изучаем влияние изменения редокс-состояния Pc и cyt_f на константу их связывания. Моделирование показало, что при pH раствора 7 и ионной силе 100 мМ константа связывания восстановленного Pc и окисленного cyt_f примерно в 1.5 раза выше, чем для окисленного Pc и восстановленного cyt_f. При изменении pH раствора (4-10 единиц) и ионной силы (50-300 мМ) константа связывания восстановленного Pc и окисленного cyt_f выше или равна константе связывания окисленного Pc и восстановленного cyt_f.

Данный результат связан с тем, что у окисленного cyt_f вокруг области связывания Pc расположен более высокий положительный электростатический потенциал, чем у восстановленного cyt_f. А вокруг восстановленного Pc более высокий отрицательный потенциал, чем вокруг окисленного Pc. Данный результат показывает, что при моделировании транспорта электрона Pc от цитохромного b₆f комплекса к фотосистеме I необходимо учитывать изменение электростатического потенциала вокруг Pc и cyt_f при изменении их редокс-состояния.

Литература.

1. Kovalenko I. B., Abaturova A. M., Gromov P. A., Ustinin D. M., Grachev E. A., Riznichenko G. Yu., Rubin A. B. Direct simulation of interaction of plastocyanin and cytochrome f in solution // Phys. Biol. Vol. 6, 2006. P. 121-129.