

ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ СПЕКТРОВ КРУГОВОГО ДИХРОИЗМА ЦИТОХРОМ С ОКСИДАЗЫ

Дюба А.В.

МГУ им.Ломоносова, Биологический факультет, кафедра биофизики,
Россия, 119992, Москва, Воробьевы горы, тел. (495)939-1116, факс (495)939-1115,
E-mail:dyubon@mail.ru

Круговой дихроизм – чувствительный и информативный метод исследования механизма работы различных ферментов. Этот метод позволяет оценить симметричность поглощающей молекулы. Если молекула не имеет центра инверсии, то она неодинаково поглощает правополяризованные и левополяризованные световые волны, так как соответствующие дипольные моменты переходов не совпадают друг с другом. Поэтому метод кругового дихроизма применим к сложным ферментам, содержащим в своем составе асимметричные компоненты. Таким ферментом является цитохром *c* оксидаза, терминальный фермент дыхательной цепи митохондрий.

Среди работ, посвященных цитохром *c* оксидазе, исследования спектров кругового дихроизма занимают особое положение. С одной стороны, по этому вопросу имеются экспериментальные данные[1], с другой – им не дано надлежащего объяснения. Не выяснено, как соотносятся максимумы дихроизма и спектральные свойства основных вращающихся компонент фермента – гемов *a* и *a*₃. Не решен вопрос о существовании экситонного взаимодействия между гемами. Кроме того, не дано квантовомеханического объяснения полученных спектров.

В нашей работе мы разобрались в причинах возникновения асимметричности гема *a*₃. Она может быть обусловлена несимметричностью заместителей порфиринового кольца (гидрофобного хвоста, с одной стороны, и формильной группы, с другой) либо влиянием белкового окружения. Асимметрия гема ведет за собой снятие вырождения перехода, который соответствует полосе *Sore* в спектре поглощения фермента (т.е. расщепление по энергии V_x и V_y – переходов в порфириновом кольце). Один из них ответственен за поглощение правополяризованной волны, другой – левополяризованной компоненты.

Результаты работы. На основе трехмерной структуры (PDB:1V54) рассчитаны энергетические уровни гема *a*₃ (без гидрофобного хвоста), получены энергии и направления дипольных моментов V_x и V_y – переходов, ответственных за вращательные способности гема, и сопоставлены полученные данные с результатами эксперимента.

Литература.

1. *Tiesjema, R. H., and Van Gelder, B. F.* Biochemical and biophysical studies on cytochrome *c* oxidase XVI. Circular dichroic study of cytochrome *c* oxidase and its ligand complexes // *Biochimica et Biophysica Acta* том 347, номер 2, 1974. Стр. 202-214