

МАРКОВСКАЯ МОДЕЛЬ АКТИВНОГО ЦЕНТРА ФЕРМЕНТАТИВНЫХ СИСТЕМ

Васильева Л.Ю., Уварова Л.А., Романова Е.Ю.¹

ФГБОУ ВПО МГТУ «СТАНКИН», Москва, Россия,

¹ФГБОУ ВО Тверская сельскохозяйственная академия, Тверь, Россия

127055, Вадковский пер., д. 3А

¹170904, Тверская область, г. Тверь, ул. Маршала Василевского (Сахарово), д. 7

E-mail: kati-v@yandex.ru

Ферменты – сложные самоорганизующиеся системы, участвующие в химических реакциях и технологических процессах в роли катализаторов. Химическая природа ферментов различна, но они имеют одно общее свойство; функционирование осуществляется специфическим участком – активным центром, который взаимодействует с низкомолекулярными соединениями – субстратами. Такое взаимодействие осуществляется в несколько стадий и сопровождается конформационными изменениями (изменение длин связей и положений атомов в пространстве) в ближайшем окружении активного центра и белковом матриксе. Согласно концепции «белок – машина» [1] конформационные изменения вызывают напряжения в молекуле фермента.

Для моделирования функционирования активных центров использовался аппарат марковского случайного процесса с дискретными состояниями и дискретным временем (цепь Маркова) [2]. На главной диагонали переходной матрицы находятся вероятности P_{ij} того, что система останется в состоянии S_i . Вероятности переходов P_{ij} , которые зависят от высоты активационных барьеров и от которых зависит скорость ферментативных реакций рассчитывается по формуле:

$$P_{ij} = \frac{k_0}{\omega_0} \exp \frac{-\Delta F_{ij}}{kT} \quad (1),$$

где $k_0 = \frac{kT}{n}$ - частота тепловых флуктуаций, $\omega_0 \approx 10^{13} \text{ c}^{-1}$ - собственная частота молекулярной конструкции при $T = 300 \text{ K}$, $\Delta F_{ij} = F_{ij} - F_i$ - минимальная свободная энергия, которая образуется в результате флуктуации, необходимая для преодоления активационного барьера, характеризующего переходное состояние, F_i - свободная энергия состояния, из которого система переходит.

Таким образом, модель позволяет проанализировать вероятности переходов из одних состояний в другие при разных условиях.

Литература.

1. Чернавский Д.С., Чернавская Н.М. «Белок – машина». Биологические макромолекулярные конструкции. – М.: Янус-К, 1999. 256 стр.
2. Вентцель Е.С. Исследование операций. - М.: Высшая школа, 2001 - 208 с.