

ПРИМЕНЕНИЕ КЛАССИЧЕСКОЙ ТЕОРИИ ОПТИЧЕСКОЙ АКТИВНОСТИ К МОДЕЛИРОВАНИЮ СПЕКТРОВ ПОГЛОЩЕНИЯ И КРУГОВОГО ДИХРОИЗМА ЦИТОХРОМ *c* – ОКСИДАЗЫ

Дюба А.В.

Институт физико-химической биологии им. А.Н.Белозерского, МГУ им.

М.В.Ломоносова

Россия, 119992, г. Москва, Воробьевы горы,

Тел.: (495)939-55-49

E-mail: dyubon@gmail.com

Цитохром *c*-оксидаза — один из ключевых ферментов аэробного дыхания, служащий генератором протонного потенциала. Предметом многих исследований служит механизм сопряжения электронного и протонного транспорта в этом ферменте. Среди экспериментальных методов изучения этой проблемы особое место занимает спектроскопия кругового дихроизма (КД). Этот метод позволяет оценить симметричность поглощающей молекулы. Если молекула не имеет ни центра инверсии, ни плоскости симметрии, то она неодинаково поглощает правополяризованные и левополяризованные световые волны и называется оптически активной. Оптическая активность цитохром *c*-оксидазы в ближней УФ и видимой области спектра (400-600 нм) связана с наличием двух гемов, низкоспинового гема *a* и высокоспинового гема *a₃*, имеющих полосы поглощения в этих областях спектра, а также расположенных вблизи них ароматических аминокислотных остатков.

Несмотря на то, что спектры КД цитохром *c*-оксидазы были экспериментально зарегистрированы [1], теоретического объяснения наблюдаемой формы спектра и положений максимумов на нем не было предложено.

В настоящей работе предлагается модель, позволяющая на основе данных 3D-структуры (PDB:1V55) выявить факторы, обуславливающие наблюдаемый сигнал КД цитохром *c*-оксидазы. Модель основана на классической теории оптической активности [2].

При моделировании спектров поглощения и КД восстановленной формы цитохром *c*-оксидазы было установлено, что взаимодействие двух гемов не может объяснить наблюдаемую величину и форму сигнала. Основной вклад в оптическую активность, обуславливающий наблюдаемый вид спектра, дает взаимодействие гемов с находящимися вблизи них остатками ароматических аминокислот.

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
2. Applequist, J., R.Sundberg, K., Olson, M. L., and Weiss, L. C. A normal mode treatment of optical properties of a classical coupled dipole oscillator system with Lorentzian band shapes // *J. Chem. Phys.* том 70, 1979. Стр. 1240-1246, 1979