

## ПРОГРАМНОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ProKSim ДЛЯ МОДЕЛИРОВАНИЯ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ БЕЛКОВ С ПОМОЩЬЮ МЕТОДА МНОГОЧАСТИЧНОЙ БРОУНОВСКОЙ ДИНАМИКИ

Хрущёв С.С.<sup>1</sup>, Абатурова А.М.<sup>1</sup>, Устинин Д.М.<sup>1</sup>, Громов П.А.<sup>2</sup>,  
Коваленко И.Б.<sup>1</sup>, Грачёв Е.А.<sup>2</sup>, Ризниченко Г.Ю.<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Биологический факультет, каф. биофизики

<sup>2</sup>Физический факультет, каф. компьютерных методов физики

Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова

Россия, 119991, Москва, Ленинские горы; E-mail: [styx@biophys.msu.ru](mailto:styx@biophys.msu.ru)

Разработана компьютерная программа ProKSim (Protein Kinetics Simulator), предназначенная для моделирования кинетики взаимодействия макромолекул в растворе методом многочастичной броуновской динамики с учётом электростатических взаимодействий [1]. В программе реализована возможность анализа структуры экспериментально полученных белок-белковых комплексов и моделирование процесса образования комплексов *in silico*. Конформационная подвижность молекул не учитывается (молекулы рассматриваются как твёрдые тела), трёхмерная модель молекул строится по данным Protein Data Bank (PDB).

При анализе загружаемой из файла четвертичной структуры комплекса выводится матрица расстояний между всеми парами аминокислотных остатков и выводится список наиболее тесно контактирующих остатков (нативные контакты). В результате компьютерного моделирования может быть получена статистика контактов пар аминокислотных остатков при сближении и взаимодействии белков. При задании критерия образования белок-белковых комплексов могут быть получены кинетические параметры реакции (зависимость концентрации комплексов от времени и значение константы скорости реакции образования комплексов) и структуры отдельных комплексов, которые могут быть в дальнейшем исследованы другими методами, например, с помощью молекулярной динамики.

Проведено исследование модельной кинетики взаимодействия белков фотосинтетической электрон-транспортной цепи пластоцианина и цитохрома *f* при различных значениях ионной силы и pH раствора. Полученные результаты находятся в согласии с экспериментальными данными [2] и опубликованными ранее результатами моделирования [1].

Программа может использоваться с интерфейсом командной строки (кроссплатформенная Windows/Linux версия) и с графическим пользовательским интерфейсом (только Windows версия с возможностью визуального контроля моделируемого процесса и сохранения результатов моделирования как видеофайла в формате AVI с использованием технологии OpenGL). Исполняемые файлы доступны для загрузки по адресу [http://www.biophys.msu.ru/science/complex\\_systems/ProKSim/](http://www.biophys.msu.ru/science/complex_systems/ProKSim/). Исходный код может быть предоставлен по запросу.

Работа поддержана грантами РФФИ 11-04-01019-а и 11-04-01268-а.

### 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 plastocyanin and cytochrome *f* interactions in solution // Phys. Biol., **3**, 2006, pp. 121–129.
2. Niwa S., Ishikawa H., Nikai S., Takabe T. Electron Transfer Reactions between Cytochrome *f* and Plastocyanin from *Brassica komatsuna* // J Biochem, **88** (4), 1980, pp. 1177–1183.