

# РОЛЬ ТОЧЕЧНЫХ ЗАРЯДОВ ВО ВЗАИМОДЕЙСТВИИ БЕЛКОВ ФЕРРЕДОКСИНА И ФЕРРЕДОКСИН:НАДФ<sup>+</sup>-ОКСИДОРЕДУКТАЗЫ

Дьяконова А.Н., Абатурова А.М., Коваленко И.Б.,  
Ризниченко Г.Ю., <sup>1</sup>Громов П.А., Грачев Е.А.

Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова,  
Биологический ф-т, каф. Биофизики,  
Россия, 119992, Москва, Ленинские горы, МГУ,  
Тел. (495)9390289, e-mail: [alex-diakonova@yandex.ru](mailto:alex-diakonova@yandex.ru)

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

Белок ферредоксин (Фд) служит конечным акцептором фотосистемы I в электрон-транспортной цепи фотосинтеза. Он диффундирует в стромальном пространстве тилакоида хлоропласта и взаимодействует с белком ферредоксин:НАДФ<sup>+</sup>-оксидоредуктазой (ФНР), передавая ей электроны. ФНР, в свою очередь, катализирует восстановление НАДФ<sup>+</sup> для цикла Кальвина. Целью нашей работы является прямое компьютерное моделирование диффузии Фд и его взаимодействия с ФНР. Мы рассматривали Фд и ФНР из бактерии *Anabaena*, кинетические данные их реакции были взяты из работы [1].

В модели молекулы Фд и ФНР представляются как твердые тела с определенным распределением зарядов на них, они совершают поступательное и вращательное движение в вязкой среде под действием случайной и внешней электростатической силы [2]. Для определения коэффициентов вязкого трения молекулы белков были аппроксимированы эллипсоидами вращения. Также для упрощения моделирования столкновения Фд и ФНР они были аппроксимированы набором сфер.

Для Фд, ФНР и нескольких точечных мутантов последней нами были построены их электростатические эквипотенциальные поверхности. Изменение формы эквипотенциальных поверхностей мутантных форм ФНР и сопоставление этих результатов с кинетическими константами образования комплекса между Фд и ФНР выявило важную роль точечных зарядов во взаимодействии исследуемых белков.

## Литература

1. Hurley J.K., Hazzard J.T., Martinez-Julvez M., Medina M., Gomez-Moreno C. and Tollin G. Electrostatic forces involved in orienting *Anabaena* ferredoxin during binding to *Anabaena* ferredoxin:NADP<sup>+</sup> reductase: site-specific mutagenesis, transient kinetic measurements, and electrostatic surface potentials // *Protein Sci.* V. 8, 1999. P. 1614-1622.
2. 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 // *Physical Biology* V. 3(6), 2006. P. 121-129.