

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССА ОБРАЗОВАНИЯ КОМПЛЕКСА ФЕРРЕДОКСИНА И ФЕРРЕДОКСИН:НАДФ⁺-ОКСИДОРЕДУКТАЗЫ

Дьяконова А.Н., Коваленко И.Б., Абатурова А.М., Ризниченко Г.Ю.

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

Конечным этапом электрон-транспортной цепи фотосинтеза является передача электрона с фотосистемы I на ферредоксин, который, в свою очередь, передает электроны на белок ферредоксин:НАДФ⁺-оксидоредуктазу (ФНР). ФНР катализирует восстановление НАДФ⁺ для цикла Кальвина. Наша работа посвящена прямому компьютерному моделированию образования предварительного комплекса между ферредоксином и ФНР. Мы рассматривали ферредоксин и ФНР бактерии *Anabaena*.

В модели молекулы белков диффундируют в кубическом реакционном объеме под действием случайной броуновской силы [1, 2]. В результате мы получаем зависимость количества образовавшихся комплексов от времени, то есть константу скорости реакции второго порядка.

На модели мы исследовали кинетику взаимодействия ферредоксина и ФНР дикого типа и нескольких мутантных форм. Нами были получены зависимости константы скорости формирования предварительного комплекса от ионной силы для ФНР дикого типа и ее точечных мутантов. Полученные результаты сравнили с экспериментальными данными [3] и получили качественное соответствие. Также нами была разработана программа для количественного сравнения электростатических потенциалов белков и вычисления similarity index (SI) [4], «коэффициента похожести» потенциалов двух белков.

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. P. 121-129.
2. Kovalenko I.B., Diakonova A., Abaturova A., Riznichenko G. Direct simulation of ferredoxin and FNR complex formation in solution // *Proceedings of the 16th International Symposium Flavins and Flavoproteins* 2008. P. 437-442.
3. Hurley J.K., Hazzard J.T., Martinez-Julvez M., Medina M., Gomez-Moreno C., Tollin G. Electrostatic forces involved in orienting *Anabaena* ferredoxin during binding to *Anabaena* ferredoxin:NADP⁺ reductase: site-specific mutagenesis, transient kinetic measurements, and electrostatic surface potentials // *Protein Sci.* **8**, 1999. P. 1614-1622.
4. Blomberg N., Gabdouliline R.R., Nilges M., Wade R.C. Classification of protein sequences by homology modeling and quantitative analysis of electrostatic similarity // *Proteins: Str., Function and Genetics*, **37**, 1999. P. 379-387.