

МОДЕЛЬ БРОУНОВСКОЙ ДИНАМИКИ ОБРАЗОВАНИЯ КОМПЛЕКСА ЦИТОХРОМА C И III ДЫХАТЕЛЬНОГО КОМПЛЕКСА

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

Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, биологический ф-т, кафедра биофизики, Россия, 119991, Москва, Ленинские горы 1, стр. 12, +7(495)9390289, abaturova@list.ru

В митохондриях при аэробном дыхании электроны от НАДН через дыхательные комплексы (I-III) переносятся на O_2 с образованием градиента протонов на внутренней мембране, который используется АТФ-синтазой для синтеза АТФ. Цитохром с (цит.с) переносит электроны от цитохрома c1 (цит.с1) – субъединицы III комплекса – в межмембранном пространстве митохондрии и кристах к IV комплексу. Расстояние между мембранами в кристах может увеличиваться, ухудшая эффективность дыхания [1]. Механизм этого процесса не до конца изучен. Мы построили модель броуновской динамики диффузии цит.с и образования предварительного комплекса с III комплексом в растворе с помощью модели броуновской динамики ProKSim [2]. Мы использовали PDB координаты атомов димера III комплекса из быка 1BGY и цит.с из лошади 3O1Y. Комплекс белков цит.с-цит.с1 считался образованным если энергия его по модулю была больше 3.4 кТ, а расстояние между редокс центрами меньше 35 Å [3].

В первой серии численных экспериментов для III комплекса учитывали заряды только от одной молекулы цит.с1 в димере III комплекса. Полученное значение константы связывания при ионной силе 130 мМ $1.1 \cdot 10^9 \text{ M}^{-1}\text{s}^{-1}$ меньше, чем величина соответствующей константы в растворе для реакции цит.с-цит.с1 $1.7 \cdot 10^9 \text{ M}^{-1}\text{s}^{-1}$. Это связано с геометрическим ограничением второй субъединицей димера III комплекса области для подхода и формирования предварительного комплекса. Во второй серии экспериментов учитывались заряды на всех атомах III комплекса. Область III комплекса, обращенная в люмен, имела обширную область отрицательного потенциала, с которой связывался положительно заряженный цит.с1 (+8). Константа связывания была примерно такая же как и для случая реакции цит.с-цит.с1 $1.6 \cdot 10^9 \text{ M}^{-1}\text{s}^{-1}$. По-видимому, электростатический потенциал от второй субъединицы димера III комплекса способствует более быстрому приходу цит.с в область связывания. Добавление в модель IV комплекса позволит изучить влияние расстояния между мембранами кристы на скорость транспорта электронов цит.с.

Работа выполнена с использованием оборудования Центра коллективного пользования сверхвысокопроизводительными вычислительными ресурсами МГУ имени М.В. Ломоносова, при поддержке РФФИ, проект № 19-04-00999.

Литература.

1. S.E. Siegmund et al. // iScience, vol. 6, 2018, 83-91
2. Хрущев С.С. и др. // КИМ, том 5, № 1, 2013, 47-64.
3. А. М. Абатурова и др. // Сборник научных трудов VI Съезда биофизиков России, Т. 1., 2019, 40.