

МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ ФУНКЦИОНИРОВАНИЯ ПЕРОКСИДАЗЫ ВНЕКЛЕТОЧНОГО ЛИГНОЛИТИЧЕСКОГО КОМПЛЕКСА ГРИБА *PANUS* *TIGRINUS*

Фурсова П. В., Кадималиев Д. А.¹, Лаврова А. И.²

Биологический факультет МГУ имени М.В.Ломоносова, fursova@biophys.msu.ru

¹Биологический факультет МГУ имени Н.П. Огарева, Саранск

²Физический факультет Университета имени Гумбольдтов, Берлин

Биодеградация лигнина комплексом ферментов (ВЛФК) гриба *P.tigrinus* – сложный, многоступенчатый процесс, обусловленный изменениями параметров среды (рН, температура, ионная сила, состав питательной среды), так и внутренней регуляцией метаболизма. Наиболее исследованной областью (экспериментально) на данный момент является блок процессов, связанных с расщеплением лигнина ферментами ВЛФК. В частности, экспериментально исследована кинетика работы «главных» ферментов комплекса: лакказы, Мп-пероксидазы и пероксидазы.

В данной работе рассматривается математическая модель пероксидазы. Экспериментально показано, что фермент расщепляет продукты реакции лакказы – олигофенолы – до монофенольных и карбоксильных компонент. Также было показано, что конечные продукты могут активировать фермент, то есть существует положительная обратная связь. При построении модели учитывались все эти факты и такие экспериментально известные характеристики пероксидазы, как зависимость от рН среды и концентрации пероксидазы. Зависимость активности пероксидазы от уровня кислотности достаточно сложная: согласно экспериментальным данным фермент может в присутствии перекиси водорода разрушать лигниновую компоненту, а при сдвиге в сторону более кислых рН и отсутствии перекиси, пероксидаза способна снова полимеризовать фрагменты лигниновой составляющей древесины.

В модели исследуется динамика стационарных концентраций продуктов, олигофенолов и монофенолов и карбоксильных соединений в зависимости от общей концентрации белка, перекиси и рН среды. Начальные концентрации белка и перекиси были оценены исходя из экспериментальных данных. При исследовании стационарной динамики концентрации карбоксильных и монофенольных соединений (P_{sum}) показано, что рН оптимум для фермента находится в районе 6-7, что соответствует экспериментальным данным. Также в модели получен диапазон изменения концентраций белка и перекиси, в котором выход монофенолов и карбоксильных соединений максимален.

Результаты моделирования можно использовать в качестве рекомендаций для будущих экспериментальных исследований.